



FACULDADE DE
CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
UNIVERSIDADE NOVA DE LISBOA

Departamento de Física

ESTUDO DE TRANSIÇÕES A DOIS FOTÕES EM IÕES COM UM E DOIS ELECTRÕES

Pedro Manuel Duarte Gonçalves Amaro

Dissertação apresentada na Faculdade de
Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de
Lisboa para obtenção do grau de Mestre em
Engenharia Física

Orientador: Prof. Doutor José Paulo dos Santos

LISBOA

2007

Agradecimentos

Quero agradecer ao meu Orientador, José Paulo Santos pela interesse demonstrado pelo meu trabalho e, principalmente, a ajudar-me a clarificar as minhas ideias.

Agradeço a Paul Indelicato e Andrew Surzhykov pela boa estadia que tive em Paris e a fornecer-me novas ideias para o meu trabalho.

Por último quero exprimir a minha gratitude pela minha família e amigos pelo apoio que me deram, principalmente nos primeiros meses da dissertação.

Este trabalho foi financiado pela FCT (POCTI/FAT/44279/2002), Fundo da Comunidade Europeia Feder (POCTI/0303/2003) e pelo programa Pessoa (Contrato nº 10721NF).

Resumo

Neste trabalho foi efectuado um estudo teórico de todas as transições de emissão espontânea a dois fótons dos estados iniciais $n = 2, 3$ em iões hidrogenoides. Foram obtidos valores precisos para a taxa de emissão através da resolução da equação de Dirac e da utilização de uma base de B-splines para valores da carga nuclear Z até 92.

Foram também calculadas as taxas de transição a dois fótons para os estados 2^1S e 2^3S_0 em iões heliúmoides na aproximação que os electrões não interactuam entre si. Os resultados obtidos estão de acordo com o esperado.

Este trabalho é a continuação de um trabalho anterior na qual foi efectuado um estudo da transição a dois fótons $2s \rightarrow 1s$ em sistemas hidrogenoides usando uma base de B-splines [1] e uma dedução de uma expressão teórica para a taxa de emissão a dois fótons em sistemas heliúmoides [2].

Abstract

In this work was made a theoretical study for all two-photon transitions, concerning spontaneous emission, from initial states with $n = 2, 3$ in hydrogenic ions. High-precision values of the relativistic two-photon emission decay rates with nuclear charge Z up to 92 are obtained through the use of finite basis sets for the Dirac equation constructed from B-Splines. It was also made an evaluation of the two-photon decay rates from the 2^1S_0 and 2^3S_0 states of heliumlike ions in the approximation that both electrons do not interact each other. The numerical results obtained in this work are in good agreement with other theoretical results.

This work is the continuation of previous ones, in which was studied the two-photon transition $2s \rightarrow 1s$ in hydrogen-like systems using a B-splines basis set [1] and was made a derivation of a theoretical expression for the two-photon emission rate of two-electron systems [2].

Notação

A lista seguinte refere os símbolos usados no trabalho. A primeira coluna indica o símbolo usado, a segunda coluna refere uma definição resumida e a terceira indica a expressão de definição ou a primeira expressão contendo o símbolo que surge no texto.

Letras latinas

| | | |
|--------------------|--|--------|
| \mathbf{A}_μ | quadri-vector potencial | (2.7) |
| \mathbf{A} | potencial vector | (2.21) |
| B_i | B-spline de ordem i | (2.81) |
| c | velocidade da luz | (2.13) |
| E_n | Energia do electrão no nível n | (2.15) |
| $\hat{\mathbf{e}}$ | vector de polarização unitário | (2.23) |
| G | parâmetro de <i>gauge</i> | (2.20) |
| J | número quântico orbital total de um sistema de electrões | (5.2) |
| j | número quântico orbital total de um electrão | (2.40) |
| \mathbf{j}_μ | operador de corrente de Dirac | (2.8) |
| j_L | função esférica de Bessel | (2.34) |
| \mathbf{k} | vector de número de onda | (2.23) |
| L | ordem do multipolo | (2.30) |
| l | número quântico orbital | (2.83) |
| $\bar{M}_{f,i}$ | elementos de matriz radiais | (2.41) |
| M | número quântico magnético total | (5.2) |
| m | número quântico magnético | (2.40) |
| N | operador normal | (2.8) |

| | | |
|--|---|--------|
| n | número quântico principal | (2.15) |
| P | solução radial da equação de Dirac (composte maior) | (2.42) |
| $P_{i \rightarrow f}$ | probabilidade de um processo de realizar-se | (2.28) |
| Q | solução radial da equação de Dirac (composte menor) | (2.42) |
| S | matriz S | (2.3) |
| $S_{i \rightarrow f}^{(n)}$ | matriz S num processo $i \rightarrow f$ de ordem n | (2.11) |
| $S_c^{(e)}$ | propagador de um electrão sem correcções radiativas | (2.16) |
| $S_e^{(e)}$ | aproximação do propagador com correcções radiativas | (2.90) |
| T | operador cronológico ou de Dyson | (2.6) |
| V | hamiltoniano de interacção | (2.7) |
| \overline{W} | Taxa total de emissão espontânea de dois fotões | (2.48) |
| \overline{W}^r | Taxa total de emissão espontânea de dois fotões com Γ_n | (2.85) |
| $\overline{W}^{\Theta_1 L_1 \Theta_2 L_2}$ | Taxa de emissão espontânea de dois fotões $\Theta_1 L_1 \Theta_2 L_2$ | (2.49) |
| $\overline{w}^{\Theta L}$ | Taxa de emissão espontânea de um fotão ΘL | (4.6) |
| x | quadri-vector de posição | (2.7) |
| Y_{LM} | esférico harmónico | (2.30) |
| $\mathbf{Y}_{L,L,M}$ | vector esférico harmónico | (2.31) |
| Z | carga nuclear | (4.1) |

Letras gregas

| | | |
|-----------------------|-------------------------------|--------|
| α | constante de estrutura fina | (2.12) |
| $\boldsymbol{\alpha}$ | matriz de Dirac | (2.21) |
| β | matriz de Dirac | (2.21) |
| Φ | Vector de estado | (2.3) |
| Γ_n | largura do nível n | (2.85) |
| ψ_n | função de onda de um electrão | (2.15) |
| θ | densidade de carga | (2.21) |
| ϑ | função escalar arbitrária | (2.20) |
| Θ | tipo de multipolaridade | (2.50) |
| ω | frequência do fotão virtual | (2.23) |

Regras usadas

- Vectores são representados em negrito (do inglês "bold");
- Índices repetidos indicam uma soma;
- Um índice grego tem quatro componentes 1,2,3,4 sendo a quarta componente definida como ix_4 de modo a que $\mathbf{x}_\mu \mathbf{x}_\mu = \mathbf{x}_j \mathbf{x}_j - \mathbf{x}_4 \mathbf{x}_4$;
- Um índice itálico tem três componentes;
- Um acento circunflexo sobre um vector indica um vector unitário: $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$;
- As matrizes γ_μ são definidas como: $\gamma_j = -i\beta\alpha_j$, $\gamma_4 = \beta$;
- Uma barra sobre a função de onda de um electrão tem o seguinte significado:
 $\overline{\psi} = \psi^* \beta$;
- Um acento circunflexo sobre o quadrivector de potencial indica o seguinte:
 $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{x}) = \gamma_\mu \mathbf{A}_\mu(\mathbf{x})$;

Índice de Matérias

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Introdução | 11 |
| 2 | Estudo teórico do processo de transição a dois fótons | 13 |
| 2.1 | Representação de interação em Electrodinâmica quântica, Matriz S . | 13 |
| 2.1.1 | Quantificação do campo | 14 |
| 2.1.2 | Matriz S referente ao processo de emissão espontânea de dois fótons | 16 |
| 2.1.3 | Expansão em multipólos | 20 |
| 2.2 | Resolução da equação radial de Dirac | 25 |
| 2.3 | Considerações sobre o cálculo teórico da transição a dois fótons entre dois estados genéricos (n, l, j) | 30 |
| 3 | Implementação computacional do modelo estudado | 33 |
| 3.1 | Resolução da equação de Dirac | 33 |
| 3.2 | Cálculo de todas as multipolaridades | 35 |
| 3.2.1 | Cálculo de uma multipolaridade | 36 |
| 3.2.2 | Rede de integração | 37 |
| 3.2.3 | Integração usando o método de Gauss- Legendre | 38 |
| 3.3 | Integração em frequência | 38 |
| 4 | Análise dos resultados obtidos | 41 |
| 5 | Estudo teórico de transições em iões heliumoides | 56 |
| 5.1 | Resultados preliminares | 59 |
| 6 | Conclusão | 63 |
| | Bibliografia | 63 |

| | |
|--------------------|---|
| ÍNDICE DE MATÉRIAS | 8 |
|--------------------|---|

| | |
|------------|----|
| Apêndice A | 67 |
|------------|----|

Índice de Figuras

| | | |
|-----|--|----|
| 2.1 | Diagrama de Feynman associado ao processo de emissão espontânea de dois fótons. | 17 |
| 2.2 | Representação de oito B-splines de ordem $k = 3$ | 29 |
| 3.1 | Fluxograma do programa de cálculo da taxa de emissão espontânea para diversas transições | 34 |
| 3.2 | Fluxograma da etapa do cálculo referente à obtenção dos valores próprios e funções próprias da equação radial de Dirac. | 34 |
| 3.3 | Fluxograma da etapa do cálculo referente ao cálculo das diversas multipolaridades. | 35 |
| 3.4 | Fluxograma do cálculo de uma multipolaridade. | 36 |
| 3.5 | Fluxograma da rede de integração. | 37 |
| 3.6 | Fluxograma do cálculo de Expressão (2.86) para uma frequência ω_1 e termo $\lambda_1 L_1 \lambda_2 L_2$ | 39 |
| 4.1 | Distribuição em frequência $\psi(y)$ da transição $2s \rightarrow 1s$ para $Z=1, 40$, e 92. A variável y representa a fracção de energia de um dos dois fótons. | 45 |
| 4.2 | Distribuição em frequência $\psi(y)$ da transição $3s \rightarrow 1s$ para $Z=1, 40$, e 92. A variável y representa a fracção de energia de um dos dois fótons. | 46 |
| 4.3 | Distribuição em frequência das contribuições $E1$, $E1M2$ e $2M1$ para a transição $3s \rightarrow 1s$ com $Z=92$. A variável y representa a fracção de energia de um dos dois fótons. | 47 |
| 4.4 | Distribuição em frequência $\psi(y)$ da transição $6s \rightarrow 1s$ para $Z=1, 40$, e 92. A variável y representa a fracção de energia de um dos dois fótons. | 48 |
| 4.5 | Distribuição em frequência $\psi(y)$ da transição $3d_{3/2} \rightarrow 1s$ para $Z=1, 40$, e 92. A variável y representa a fracção de energia de um dos dois fótons. | 48 |
| 4.6 | Distribuição em frequência $\psi(y)$ das contribuições $E1M1$ e $E1E2$ para a transição $2p_{1/2} \rightarrow 1s$ com $Z=40$ | 49 |

| | | |
|------|--|----|
| 4.7 | Distribuição em frequência $\psi(y)$ da transição $2p_{1/2} \rightarrow 1s$ para $Z=1, 40,$ e 92. A variável y representa a fracção de energia de um dos dois fotões. | 49 |
| 4.8 | Distribuição em frequência $\psi(y)$ das contribuições $E1M1$ para a tran- sição $2p_{3/2} \rightarrow 1s$ | 50 |
| 4.9 | Distribuição em frequência $\psi(y)$ das contribuições $E1E2$ para a tran- sição $2p_{3/2} \rightarrow 1s$ | 51 |
| 4.10 | O mesmo da Figura (4.1) para a transição $2p_{3/2} \rightarrow 1s$ | 51 |
| 5.1 | Distribuição em frequência $\psi(y)$ da transição $1s2s^1S_0 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ para $Z=2, 40,$ and 92. A variável y representa a fracção de energia de um dos dois fotões. | 61 |
| 5.2 | Distribuição em frequência $\psi(y)$ da transição $1s2s^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ para $Z=10, 40,$ and 92. A variável y representa a fracção de energia de um dos dois fotões estando. | 62 |

Índice de Tabelas

| | | |
|-----|--|----|
| 4.1 | Contribuições multipolares incluídas neste cálculo para a taxa de emissão espontânea da transição $2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ | 42 |
| 4.2 | Contribuições multipolares incluídas neste cálculo para a taxa de emissão espontânea da transição $2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ | 42 |
| 4.3 | Contribuições multipolares incluídas neste cálculo para a taxa de emissão espontânea da transição $3s_{1/2} \rightarrow 2s_{1/2}$ | 43 |
| 4.4 | Taxa total de emissão espontânea de dois fótons (s^{-1}) para dois estados inicial e final genéricos com $n_i = 2$. Comparação dos resultados obtidos neste trabalho com todos os resultados teóricos publicados. | 43 |
| 4.5 | Taxa total de emissão espontânea de dois fótons (s^{-1}) para dois estados inicial e final genéricos com $n_i = 3$. Comparação dos resultados obtidos neste trabalho com todos os resultados teóricos publicados. | 44 |
| 4.6 | Valores de transparências para várias transições. | 46 |
| 5.1 | Contribuições multipolares incluídas neste cálculo para a taxa de emissão espontânea da transição $1s2s\ ^1S_0 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ | 59 |
| 5.2 | Contribuições multipolares incluídas neste cálculo para a taxa de emissão espontânea da transição $1s2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ | 60 |
| 5.3 | Taxa total de emissão espontânea de dois fótons (s^{-1}) para as transições $1s2s\ ^1S_0 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ e $1s2s\ ^3S_0 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ | 60 |

Capítulo 1

Introdução

A teoria atómica tem como objectivo descrever propriedades e interacções de átomos tais como os níveis de energia, tempos de vida, probabilidades de transição e secções eficazes. Uma abordagem que permite obter valores precisos tem de ter em conta efeitos relativistas, electrodinâmica quântica (QED quantum electrodynamics) e aspectos de sistemas a muitos corpos. Para além disso, o método de cálculo tem de ser tratável de modo a que possam ser obtidos resultados numéricos.

Neste trabalho foi efectuado um estudo de transição a um estudo do cálculo de probabilidades de transição dois fotões em iões hidrogenoides e heliumoides.

De modo análogo ao caso de processos a um fotão, os processos que envolvem a emissão de dois fotões pode ser espontânea ou estimulada, em quanto que no caso da absorção é só estimulada. No entanto, ocorre uma diferença importante dado que na aproximação dipolar eléctrica cada fotão tem um valor unitário de momento angular e, deste modo, certas transições que são proibidas em processos de um fotão são permitidas em processos a dois fotões. Outra distinção importante é o facto do espectro de emissão espontânea de dois fotões ser contínuo ao contrário do espectro de emissão de um fotão. Tal é possível uma vez que a conservação de energia apenas impõe que a soma de ambos os fotões seja igual à energia de transição.

O interesse por este tipo de decaimentos radiativos tem origem, entre outros, em estudos astrofísicos. A recombinação de hidrogénio é um dos processos responsáveis pelas flutuações térmicas na radiação cósmica de fundo (CMB, do inglês "cosmic microwave background") e é principalmente controlada por processos de dois fotões no estado metaestável $2s_{1/2}$ [3, 4, 5].

A espectroscopia de processos a dois fotões é utilizada na determinação da constante de Rydberg [7, 6], na medição do desvio de Lamb ("Lamb shift") [8, 9] e no teste da desigualdade de Bell [10]. Este tipo de processos atómicos também permite o estudo da violação de paridade em átomos com um ou dois electrões [11]. Devido à

interacção electro-fraca dos electrões das camadas interiores com o núcleo, os estados degenerados com paridade oposta, tais como, o caso $1s2p\ 3P0$ e $1s2s\ 1S0$ em iões heliumoides, ou o caso $1p_{1/2}$ e $1s$ em iões hidrogenoides, ficam "misturados" (mixed states). O nível de mistura pode ser obtido experimentalmente através da razão entre a contribuição $2E1$, proibida pela regra de selecção associada à paridade sem ter em conta a interacção electro-fraca, e a contribuição $E1M1$ da transição $1s2p\ 3P0 \rightarrow 1s^2\ 1S0$. A comparação entre os resultados experimentais e teóricos do nível de "mistura" permite descobrir novos conceitos para além do modelo padrão (bosões Z neutros ou novos fermiões) [12].

No âmbito deste trabalho foi efectuado um estudo de taxas de transição a dois fótons em iões hidrogenoides para uma transição genérica e em iões heliumoides para as transições $1s2s\ ^1S_0 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ e $1s2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$. Foram seguidas as seguintes etapas:

- Estudo teórico do processo de transição a dois fótons em iões hidrogenoides;
- Implementação computacional do modelo que permite o cálculo das probabilidades de transição a dois fótons em iões hidrogenoides;
- Análise dos resultados obtidos;
- Início do estudo teórico do processo de transição a dois fótons em iões heliumoides e obtenção de resultados preliminares.

Capítulo 2

Estudo teórico do processo de transição a dois fótons

2.1 Representação de interacção em Electrodinâmica quântica, Matriz S

A electrodinâmica quântica estuda os sistemas dinâmicos constituídos pelo campo electromagnético e pelo campo de electrões-positrões. Estes sistemas, tal como qualquer sistema quântico, são caracterizados por um hamiltoniano, H , que pode ser escrito como $H = H_0 + V$, onde $H_0 = H_\gamma + H_e$, é a soma dos hamiltonianos dos campos sem interacção mútua e V é o operador que descreve a interacção entre esses campos.

Esta separação pode ser utilizada para introduzir a representação de interacção em electrodinâmica quântica. Esta representação frequentemente usada em mecânica quântica para se obter soluções aproximadas por meio de teoria de perturbações. Na representação de interacção tanto os operadores de campo como o vector de estado tem dependência temporal que varia na seguinte forma

$$\begin{aligned} -i\frac{\partial F_I}{\partial t} &= [H_0, F_I] \\ -i\frac{\partial \Phi}{\partial t} &= V_I \Phi \quad , \end{aligned} \tag{2.1}$$

onde

$$\begin{aligned} V_I &= e^{iH_0 t} V e^{-iH_0 t} \\ F_I &= e^{iH_0 t} F_S e^{-iH_0 t} \quad , \end{aligned} \tag{2.2}$$

e F_S é o operador na representação de Schroedinger.

Nesta representação o vector de estado, Φ , tem a seguinte forma

$$\Phi(t) = S(t, t_0)\Phi(t_0) \quad , \quad (2.3)$$

onde $\Phi(t_0) = \Phi(t = t_0)$ e $S(t, t_0)$ é um operador que pode ser escrito na seguinte forma

$$\begin{aligned} S(t, t_0) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t \dots \int_{t_0}^t T [V_I(t'_1)V_I(t'_2)V_I(t'_3)\dots V_I(t'_n)] dt'_n \dots dt'_3 dt'_2 dt'_1 \\ &= T \left[\exp \left(-i \int_{t_0}^t V(t') dt' \right) \right] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} S_n(t, t_0) \quad , \end{aligned} \quad (2.4)$$

com

$$S_n(t, t_0) = \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t \dots \int_{t_0}^t T [V_I(t'_1)V_I(t'_2)V_I(t'_3)\dots V_I(t'_n)] dt'_n \dots dt'_3 dt'_2 dt'_1 \quad . \quad (2.5)$$

O operador de cronológico de Dyson, T , é definido da seguinte forma

$$T [V(t_1) V(t_2)] = \begin{cases} V(t_1) V(t_2) & \text{se } t_1 > t_2 \\ V(t_2) V(t_1) & \text{se } t_1 < t_2 \end{cases} \quad . \quad (2.6)$$

O operador $S(t, t_0)$ é denominado matriz S (do inglês "scattering") quando actua no vector de estado inicial $\Phi(t_0)$ retorna o estado $\Phi(t)$ no instante t .

2.1.1 Quantificação do campo

Existem dois processos formais de definir um sistema quântico. Um dos processos define o hamiltoniano do sistema através de integrais de caminho (do inglês "integral path approach") e através de um princípio variacional identifica os caminhos estacionários com os trajectos de um sistema mecânico clássico¹. A outra abordagem associa a cada tipo de campo uma determinada partícula que constitui o "quantum" do campo. De acordo com esta concepção a excitação do campo corresponde à criação de uma partícula associada ao campo.

De modo a descrever um sistema de electrões e positrões que não interactivam entre si ou um sistema de fótons, pode-se ir de uma descrição de uma função no espaço de configurações para uma função no espaço do número de partículas.

¹Desenvolvido por Feynman [13]

No caso de um sistema de fótons trata-se da quantificação do campo electromagnético na qual se efectua a expansão do quadri-vector potencial \mathbf{A}_μ em ondas planas de polaridade $\hat{\mathbf{e}}$ e número de onda \mathbf{k} . Uma onda plana corresponde à solução das equações de Maxwell na ausência de cargas. Os coeficientes são definidos, não como quantidades numéricas, mas como operadores unitários que podem ser identificados como operadores de criação ou destruição de um dado fóton com polaridade $\hat{\mathbf{e}}$ e número de onda \mathbf{k} .

No caso de um sistema de electrões é equivalente à quantificação do campo de electrões e positrões, isto é, um campo de funções ψ e $\bar{\psi}$ que satisfazem a equação de Dirac. Neste caso, a equação de Dirac, tal como as equações de Maxwell, é a equação de campo, e não a equação que descreve a dinâmica de uma partícula individual.

Quando se quantifica os campos de electrões-positrões as funções ψ e $\bar{\psi}$ são operadores, os quais tal como o caso do potencial vector para as equações de Maxwell, podem ser expandidos em soluções da equação de Dirac na ausência de um campo electromagnético externo. Neste caso os coeficientes da expansão são operadores de criação ou destruição de um electrão ou positrão.

As relações de comutação dos operadores são construídas de modo a que um dado campo siga as estatísticas associadas. No caso do campo electromagnético as relações de comutação devem ser tais que os fótons obedecem à estatística de Bose-Einstein, ou seja, o número de partículas num dado estado deve ser arbitrário. Como os electrões e positrões obedecem o princípio de exclusão de Pauli, seguem as estatísticas de Fermi-Dirac; um estado só contém 0 ou 1 partículas.

Usando estes princípios demonstra-se que operador de interacção entre o campo electromagnético e o campo de electrões-positrões é dado pela seguinte expressão [14]

$$V(t) = \int \mathbf{j}_\mu(\mathbf{x}) \mathbf{A}_\mu(\mathbf{x}) d\mathbf{r} , \quad (2.7)$$

onde $\mathbf{A}_\mu(\mathbf{x})$ é o quadri-vector de potencial vector e $\mathbf{j}_\mu(\mathbf{x})$ é o quadri-vector de fluxo de electrão definido por

$$\mathbf{j}_\mu(\mathbf{x}) = iN (\bar{\psi}(\mathbf{x}) \gamma_\mu \psi(\mathbf{x})) , \quad (2.8)$$

onde N é designado operador normal e tem como finalidade ordenar os operadores de modo a que os operadores de criação fiquem à direita dos de destruição multiplicado por 1 ou -1 conforme o número de trocas seja par ou ímpar.

A matriz S pode ser rescrita numa forma mais geral, considerando o operador de interacção (2.7) e o quadri-vector de fluxo (2.8),

$$\begin{aligned}
S(t, t_0) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int \int \int \dots \int T [U(\mathbf{x}_1)U(\mathbf{x}_2)U(\mathbf{x}_3)\dots U(\mathbf{x}_n)] d^4\mathbf{x}_n \dots d^4\mathbf{x}_3 d^4\mathbf{x}_2 d^4\mathbf{x}_1 \\
&= T \left[\exp(-i \int U(\mathbf{x}) d^4\mathbf{x}) \right] ,
\end{aligned} \tag{2.9}$$

com

$$\begin{aligned}
U(\mathbf{x}) &= -iN (\bar{\psi}(\mathbf{x})\gamma_{\mu}A_{\mu}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})) \\
&= -iN (\bar{\psi}(\mathbf{x})\hat{A}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})) .
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Um modo de interacção entre o campo electromagnético e o campo de electrões-positrões diz-se um processo de ordem n se o elemento da matriz S é proporcional a e^n sendo e a carga de um electrão. Deste modo, um processo de ordem n é descrito pela matriz $S_n(t, t_0)$.

Uma vez que os operadores \hat{A} , ψ e $\bar{\psi}$ são expressos como uma soma de operadores de criação e aniquilação para cada partícula individual, cada termo em (2.9) pode ser escrito como produtos de operadores de criação e destruição de electrões positrões e fótons em diferentes estados. As condições para as quais estes produtos têm elementos de matriz não nulos correspondentes a um dado processo $i \rightarrow f$, ou seja, de um estado com um determinado número de electrões/positrões e fótons inicial e outro final correspondem às regras de Feynman. Por exemplo, considerando a transição um electrão de um dado estado inicial para um estado final que origina emissão espontânea de dois fótons, um dos operadores de destruição deve destruir o electrão do estado inicial e três operadores de criação devem criar um electrão e dois fótons no estado final. Todos os outros operadores devem se juntar em pares de criação e destruição da mesma partícula (positrão, electrão ou fóton). A representação do processo pode ser visualizado graficamente usando um esquema de Feynman representado na Figura 2.1. As linhas finas que se dirigem do infinito até um vértice correspondem a operadores que criam ou destroem um electrão. A linha grossa corresponde a compactar todos os pares de criação e destruição da mesma partícula e a linha ondulada corresponde à criação ou destruição de um fóton.

2.1.2 Matriz S referente ao processo de emissão espontânea de dois fótons

Define-se a matriz S de ordem n de um processo $i \rightarrow f$ como

$$S_{i \rightarrow f}^{(n)} = \langle \Phi_f | S_2 | \Phi_i \rangle = \sum_k S_k^{(n)} , \tag{2.11}$$

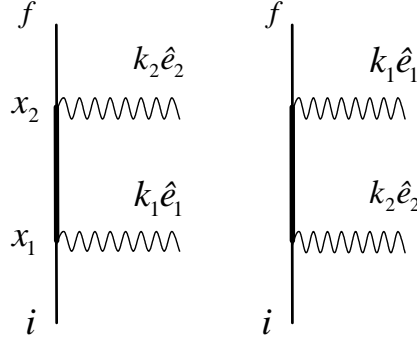


Figura 2.1: Diagrama de Feynman associado ao processo de emissão espontânea de dois fótons.

onde Φ representa, como foi atrás referido o vector de estado no espaço de número de partículas e deste modo remove-se todos os operadores unitários. Cada termo $S_k^{(n)}$ difere entre si pela ordem dos operadores de criação ou aniquilação do mesmo processo. No caso representado na Figura 2.1, o numero de termos são dois devido à possível permuta entre os dois operadores de criação de um fóton.

Os elementos de matriz que envolvem interacção de segunda ordem entre o campo electromagnético e o campo de electrões-positrões são descritos pela matriz S de segunda ordem que tem a seguinte forma [14].

$$S_2 = \alpha \int T \left[N \left(\bar{\psi}(\mathbf{x}_1) \hat{A}(\mathbf{x}_1) \psi(\mathbf{x}_1) \right) N \left(\bar{\psi}(\mathbf{x}_2) \hat{A}(\mathbf{x}_2) \psi(\mathbf{x}_2) \right) \right] d^4 \mathbf{x}_1 d^4 \mathbf{x}_2 . \quad (2.12)$$

Dentro dos vários esquemas de interacção associados a S_2 destaca-se o processo de emissão espontânea de dois fótons representado na Figura 2.1.

A matriz $S_{i \rightarrow f}^{(n)}$ para o processo representado na Figura 2.1 é expresso (em unidades atómicas $\alpha = 1/c$) por [14],

$$\begin{aligned} S_{i \rightarrow f}^{(2)} &= \frac{1}{c} \int \left[\bar{\psi}_f(\mathbf{x}_2) \hat{A}_2^*(\mathbf{x}_2) S_c^{(e)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \hat{A}_1^*(\mathbf{x}_1) \psi_i(\mathbf{x}_1) \right. \\ &\quad \left. + \bar{\psi}_f(\mathbf{x}_2) \hat{A}_1^*(\mathbf{x}_1) S_c^{(e)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \hat{A}_2^*(\mathbf{x}_2) \psi_i(\mathbf{x}_1) \right] d^4 \mathbf{x}_1 d^4 \mathbf{x}_2 \\ &= S_a^{(2)} + S_b^{(2)} . \end{aligned} \quad (2.13)$$

Os estados $\psi_i(\mathbf{x})$ e $\psi_f(\mathbf{x})$ representam como as funções de onda do electrão nos estados iniciais e final, e $A_1(\mathbf{x})$ e $A_2(\mathbf{x})$ são os potenciais dos estados do fóton 1 de polaridade $\hat{\mathbf{e}}_1$ e número de onda \mathbf{k}_1 e do fóton 2 de polaridade $\hat{\mathbf{e}}_2$ e número de onda \mathbf{k}_2 .

A função $S_c^{(e)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ representa o valor médio dos vários pares de criação e aniquilação da mesma partícula virtual (neste caso electrões e positrões) resultantes da aplicação do operador de Dyson com o operador normal. Esta função só é exacta no caso de um electrão livre que consiste na função de Green para a equação de Dirac sem um campo externo. No caso presente tem a forma

$$S_c^{(e)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \begin{cases} \sum_n \psi_n^{(+)}(\mathbf{x}_1) \psi_n^{(+)}(\mathbf{x}_2) & t_1 > t_2 \\ - \sum_n \psi_n^{(-)}(\mathbf{x}_1) \psi_n^{(-)}(\mathbf{x}_2) & t_1 < t_2 \end{cases}, \quad (2.14)$$

onde

$$\psi_n^{(\pm)}(\mathbf{x}) = \psi_{n0}^{(\pm)}(\mathbf{r}) \exp(-iE_n^{(\pm)} t) \quad , \quad (2.15)$$

correspondem às soluções da equação de Dirac de um electrão sujeito a um campo externo que neste caso é o potencial nuclear. Os somatórios em (2.14) é efectuado tanto nos estados positivos como negativos de modo a varrer uma base completa. Considerando que

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(i\omega t)}{E(1-i0) + \omega} d\omega = \begin{cases} 0 & E < 0 \\ \exp(-iEt) & E > 0 \quad t > 0 \\ -\exp(-iEt) & E < 0 \quad t < 0 \end{cases},$$

a função de Green pode ser representada numa forma mais compacta,

$$S_c^{(e)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega(t_1 - t_2)) \sum_n \frac{\psi_n(\mathbf{r}_2) \bar{\psi}_n(\mathbf{r}_1)}{E_n(1-i0) + \omega} d\omega \quad . \quad (2.16)$$

Substituindo a expressão (2.16) na equação (2.13) obtém-se o seguinte

$$S_a^{(2)} = \frac{1}{2\pi i c} \int \bar{\psi}(\mathbf{x}_2) \hat{\mathbf{A}}^*(\mathbf{x}_2) \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega(t_1 - t_2)) \quad (2.17)$$

$$\times \sum_n \frac{\psi_n(\mathbf{x}_2) \bar{\psi}_n(\mathbf{x}_1)}{E_n(1-i0) + \omega} d\omega \hat{\mathbf{A}}^*(\mathbf{x}_1) \psi(\mathbf{x}_1) d^4\mathbf{x}_1 d^4\mathbf{x}_2 \quad , \quad (2.18)$$

A transformação de *gauge* ou de gradiente define-se por

$$\begin{aligned} \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla \vartheta(\mathbf{r}, t) \\ \theta'(\mathbf{r}, t) &= \theta(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial \vartheta(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \end{aligned} \quad , \quad (2.19)$$

em que ϑ é uma função arbitrária que mantém os campos eléctricos e magnéticos invariantes. Consideremos que a função ϑ com uma dependência temporal dada por

$$\vartheta(\mathbf{r}, t) = G \frac{ic}{\omega} \exp(-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \omega t)) \quad , \quad (2.20)$$

onde G é um parâmetro arbitrário associado à invariância de *gauge* que controla a contribuição de estados do fóton longitudinais. Deste modo, definindo $\tilde{A}^*(\mathbf{x})$ como

$$\begin{aligned} \tilde{A}^*(\mathbf{x}) &= \beta \gamma_\mu \mathbf{A}_\mu^*(\mathbf{x}) \\ &= (-i\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{A}^* + \theta) \quad , \end{aligned} \quad (2.21)$$

vem

$$\tilde{A}^*(\mathbf{x}) = -i \left\{ \boldsymbol{\alpha} \cdot \left[\mathbf{A}^*(\mathbf{r}, t) + G \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|} \exp(-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \omega t)) \right] + \theta(\mathbf{r}, t) - G \exp(-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \omega t)) \right\} \quad . \quad (2.22)$$

Para um fóton descrito por ondas planas, ou seja, caracterizado por um momento \mathbf{k}_j e um vector de polarização $\hat{\mathbf{e}}_j$ ($\hat{\mathbf{e}}_j \mathbf{k}_j = 0$), os potenciais são definidos por

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) &= \frac{\hat{\mathbf{e}}}{\sqrt{\omega}} \exp(i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)) \\ \theta(\mathbf{r}, t) &= 0 \quad , \end{aligned} \quad (2.23)$$

Se na expressão (2.13) se considerar o valor de \hat{A} e não o seu conjugado para os estados dos dois fótons, está-se a estudar o caso de absorção. No caso de um dos estados do fóton ser definido por \hat{A} e outro por \hat{A}^* , o processo é conhecido por dispersão de Rayleigh [16] (se as frequências tiverem o mesmo valor trata-se da dispersão Raman). Os factores $1/\sqrt{\omega}$ da expressão (2.23) são incluídos posteriormente na expressão final.

$$\begin{aligned} \tilde{A}^*(\mathbf{x}) &= \tilde{A}_j^*(\mathbf{x}) = -i \left[\boldsymbol{\alpha} \cdot (\hat{\mathbf{e}}_j + G\hat{\mathbf{k}}_j) \exp(-i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}) - G \exp(-i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}) \right] \exp(-i\omega t) \\ &= -iA_j^*(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t) \quad , \end{aligned}$$

onde

$$A_j^* = \boldsymbol{\alpha} \cdot (\hat{\mathbf{e}}_j + G\hat{\mathbf{k}}_j) \exp(-i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}) - G \exp(-i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}) \quad . \quad (2.24)$$

Definindo os elementos de matriz nas coordenadas espaciais como

$$\langle f | A_j^* | i \rangle = \int \psi_f^*(\mathbf{r}) A_j^*(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad , \quad (2.25)$$

a expressão assume a forma

$$\begin{aligned}
 S_a^{(2)} &= \frac{1}{\sqrt{\omega_1 \omega_2 c}} \sum_n \langle f | A_2^* | n \rangle \langle n | A_1^* | i \rangle \\
 &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(it_1(-E_i + \omega - \omega_1)) \exp(it_2(E_f - \omega - \omega_2))}{E_n(1 - i0) + \omega} d\omega dt_1 dt_2 \\
 &= \frac{2\pi}{\sqrt{\omega_1 \omega_2 c}} \sum_n \frac{\langle f | A_2^* | n \rangle \langle n | A_1^* | i \rangle}{E_n - E_i + \omega_1} \delta(E_f - E_i - \omega_1 - \omega_2) \quad .
 \end{aligned} \tag{2.26}$$

O delta de Dirac na expressão (2.26) significa que as frequências dos fótons satisfazem a conservação de energia, isto é,

$$E_f - E_i = \omega_1 + \omega_2 \quad . \tag{2.27}$$

A probabilidade de um dado processo é definido do seguinte modo

$$P_{f \rightarrow i} = \left| \langle \Phi_f | S_{i \rightarrow f}^{(n)} | \Phi_i \rangle \right|^2 \quad . \tag{2.28}$$

Quando o processo considerado tem estados inicial e final pertencentes ao contínuo, como no caso em análise (uma vez que a frequência dos fótons é continua), é necessário calcular a probabilidade diferencial. De modo a obter a probabilidade diferencial, dw , é necessário multiplicar a probabilidade P pelo numero de fótons que possuem numero de onda \mathbf{k} , no intervalo $d\mathbf{k}$,

$$dw = \left| S_a^{(2)} + S_b^{(2)} \right|^2 \frac{dk_1}{(2\pi)^3} \frac{dk_2}{(2\pi)^3} \quad .$$

A integração em ω_2 conduz à expressão do cálculo da taxa de emissão diferencial

$$\frac{dw}{d\omega_1} = \frac{\omega_1 \omega_2}{(2\pi)^3 c^2} \left| \sum_n \frac{\langle f | A_2^* | n \rangle \langle n | A_1^* | i \rangle}{E_n - E_i + \omega_1} + \frac{\langle f | A_1^* | n \rangle \langle n | A_2^* | i \rangle}{E_n - E_i + \omega_2} \right|^2 d\Omega_1 d\Omega_2 \quad , \tag{2.29}$$

onde $d\Omega_j$ representa o ângulo sólido de emissão do fóton j .

2.1.3 Expansão em múltiplos

A integração da expressão (2.29) é facilitada tendo em conta as seguintes expansões em ondas planas [24]:

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathbf{e}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) &= \sum_{L,M,\lambda} \left[\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{Y}_{LM}^{(\lambda)}(\hat{\mathbf{k}}) \right] \mathbf{a}_{LM}^{(\lambda)} \\
 \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) &= \sum_{L,M,\lambda} Y_{LM}(\hat{\mathbf{k}}) \Phi \quad .
 \end{aligned} \tag{2.30}$$

O índice λ tem valores $-1, 0, 1$. A grandeza $\mathbf{Y}_{LM}^{(\lambda)}$ está relacionado com os vectores esféricos harmónicos através de

$$\begin{aligned}\mathbf{Y}_{LM}^{(0)}(\hat{\mathbf{k}}) &= \mathbf{Y}_{L,L,M}(\hat{\mathbf{k}}) \\ \mathbf{Y}_{LM}^{(1)}(\hat{\mathbf{k}}) &= -i\hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{Y}_{LM}^{(0)}(\hat{\mathbf{k}}) \\ \mathbf{Y}_{LM}^{(-1)}(\hat{\mathbf{k}}) &= \hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{Y}_{LM}(\hat{\mathbf{k}}) \quad ,\end{aligned}\tag{2.31}$$

e os coeficientes $\mathbf{a}_{LM}^{(\lambda)}$ e Φ_{LM} são dados por

$$\begin{aligned}\mathbf{a}_{LM}^{(0)} &= g_L(kr)\mathbf{Y}_{L,L,M}(\hat{\mathbf{r}}) \quad , \\ \mathbf{a}_{LM}^{(1)} &= \left(\frac{L}{2L+1}\right)^{1/2} g_{L+1}(kr)\mathbf{Y}_{L,L+1,M}(\hat{\mathbf{r}}) \\ &\quad + \left(\frac{L+1}{2L+1}\right)^{1/2} g_{L-1}(kr)\mathbf{Y}_{L,L-1,M}(\hat{\mathbf{r}}) \\ \mathbf{a}_{LM}^{(-1)} &= -\left(\frac{L+1}{2L+1}\right)^{1/2} g_{L+1}(kr)\mathbf{Y}_{L,L+1,M}(\hat{\mathbf{r}}) \quad , \\ &\quad + \left(\frac{L}{2L+1}\right)^{1/2} g_{L-1}(kr)\mathbf{Y}_{L,L-1,M}(\hat{\mathbf{r}}) \quad ,\end{aligned}\tag{2.32}$$

e

$$\Phi_{LM} = g_L(kr)Y_{LM}(\hat{\mathbf{r}}) \quad ,\tag{2.33}$$

com

$$g_L(kr) = 4\pi i^L j_L(kr) \quad .\tag{2.34}$$

A função $j_L(kr)$ é a função esférica de Bessel. Os termos com $\lambda = 1$ são termos associados a multipolos eléctricos enquanto os termos com $\lambda = 0$ estão associados a multipolos magnéticos. Os termos $\lambda = -1$ e Φ_{LM} estão associados a termos longitudinais e escalares respectivamente. Substituindo as expansões (2.30) no operador (2.24) vem

$$A_j^* = \sum_{L,M,\lambda} \left[\hat{\mathbf{e}}_j \cdot \mathbf{Y}_{LM}^{(\lambda)}(\hat{\mathbf{k}}_j) \right] \tilde{a}_{LM}^{(0)} \quad ,\tag{2.35}$$

notando que

$$\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{Y}_{LM}^{(-1)}(\hat{\mathbf{k}}) = Y_{LM}(\hat{\mathbf{k}}) \quad ,\tag{2.36}$$

onde $\hat{\mathbf{e}}_j$ é o vector de polarização e

$$\tilde{a}_{LM}^{(\lambda)} = \begin{cases} \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{a}_{LM}^{(\lambda)}, & \lambda = 1, 0 \\ G(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{a}_{LM}^{(-1)} - \Phi_{LM}) & \lambda = -1 \end{cases} . \quad (2.37)$$

As contribuições para $\lambda = -1$ são nulas caso se utilizar funções de onda exactas [24]. Deste modo a invariância de *gauge* pode ser, não só um teste se a expressão final está bem implementada, mas também uma medida da precisão das funções de onda usadas.

Substituindo as expressões (2.35) e (2.37) na expressão (2.29), integrando segundo $d\Omega_1 d\Omega_2$ e calculando o somatório sobre as polarizações possíveis obteve-se

$$\begin{aligned} \frac{dW}{d\omega_1} &= \int \int \sum_{\hat{e}_1, \hat{e}_2} \frac{dw}{d\omega_1} d\Omega_1 d\Omega_2 = \\ &= \frac{\omega_1 \omega_2}{(2\pi)^3 c^2} \sum_{L_1, M_1, \lambda_1, L_2, M_2, \lambda_2} \left| B_{L_1 M_1 \lambda_1}^{L_2 M_2 \lambda_2} + B_{L_2 M_2 \lambda_2}^{L_1 M_1 \lambda_1} \right|^2 , \end{aligned} \quad (2.38)$$

onde

$$B_{L_1 M_1 \lambda_1}^{L_2 M_2 \lambda_2} = \sum_n \frac{\langle f | \tilde{a}_{L_2 M_2}^{(\lambda_2)} | n \rangle \langle n | \tilde{a}_{L_1 M_1}^{(\lambda_1)} | i \rangle}{E_n - E_i + \omega_1} . \quad (2.39)$$

No caso de se estudar a correlacção angular estuda-se a função $dw/d\omega_1$ em (2.38) sem recorrer à integração nos angulos sólidos [15].

A redução dos elementos de matriz da expressão acima (2.39) a integrais radiais é discutida na referência [17], onde se mostra que

$$\begin{aligned} \langle f | \tilde{a}_{LM}^{(\lambda)} | i \rangle &= (-1)^{j_f - m_f} \begin{pmatrix} j_f & L & j_i \\ -m_f & M & -m_i \end{pmatrix} (-1)^{L+\lambda-1} (-1)^{j_f-1/2} \left(\frac{4\pi}{2L+1} \right)^{1/2} \\ &\times [j_f, j_i]^{1/2} \begin{pmatrix} j_f & L & j_i \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \bar{M}_{f,i}^{(\lambda,L)} , \end{aligned} \quad (2.40)$$

onde

$$\begin{aligned} \bar{M}_{f,i}^{(1,L)} &= \left(\frac{L}{L+1} \right)^{1/2} [(\kappa_f - \kappa_i) I_{L+1}^+ + (L+1) I_{L+1}^-] - \\ &\times \left(\frac{L+1}{L} \right)^{1/2} [(\kappa_f - \kappa_i) I_{L-1}^+ - L I_{L-1}^-] , \\ \bar{M}_{f,i}^{(0,L)} &= \frac{2L+1}{(L(L+1))^{1/2}} (\kappa_f + \kappa_i) I_L^+ , \\ \bar{M}_{f,i}^{(-1,L)} &= G \left[(2L+1) J^{(L)} + (\kappa_f - \kappa_i) (I_{L+1}^+ + I_{L-1}^+) - L I_{L-1}^- + (L+1) I_{L+1}^- \right] , \end{aligned} \quad (2.41)$$

e

$$\begin{aligned} I_L^\pm &= \int_0^\infty (P_f Q_i \pm P_i Q_f) j_L \left(\frac{\omega r}{c} \right) dr \quad , \\ J_L &= \int_0^\infty (P_f P_i + Q_f Q_i) j_L \left(\frac{\omega r}{c} \right) dr \quad , \end{aligned} \quad (2.42)$$

P e Q são as componentes maiores e menores da equação de Dirac, ω a frequência do fóton e a notação $[j, k, \dots]$ significa $(2l+1)(2k+1)\dots$. A função j_L é conhecida como função de Bessel de primeira ordem.

A expressão (2.38) pode ser mais simplificada tendo em conta o seguinte integral

$$S^j(2, 1) = \sum_{n_l} \frac{\bar{M}_{f, n_l}^{(\lambda_2, L_2)}(\omega_2) \bar{M}_{n_l, i}^{(\lambda_1, L_1)}(\omega_1)}{E_{n_l} - E_i + \omega_1} \Delta^j(2, 1) \quad , \quad (2.43)$$

onde

$$\Delta^j(2, 1) = \frac{4\pi[j_i, j, j_f]^{1/2}}{[L_1, L_2]^{1/2}} \begin{pmatrix} j_f & L_2 & j \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & L_1 & j_i \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \quad , \quad (2.44)$$

e

$$\theta^j(2, 1) = [2j]^{1/2} \sum_{m_j} (-1)^{m_j+m_f+1} \begin{pmatrix} j_f & L_2 & j \\ -m_f & M_2 & m_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & L_1 & j_i \\ -m_j & M_1 & m_i \end{pmatrix} \quad , \quad (2.45)$$

que, ao efectuar o somatório em m_f e a média em m_i conduz à seguinte expressão

$$\frac{d\bar{W}}{d\omega_1} = \frac{\omega_1 \omega_2}{(2\pi)^3 c^2 [j_i]} \sum_{L_1, M_1, \lambda_1, L_2, M_2, \lambda_2, m_f, m_i} \left| \sum_j [\theta^j(2, 1) S^j(2, 1) + \theta^j(1, 2) S^j(1, 2)] \right|^2 \quad . \quad (2.46)$$

Utilizando as seguintes regras de soma

$$\sum_{M_1, M_2, m_f, m_i} \theta^j(2, 1) \theta^{j'}(2, 1) = \delta_{jj'} \quad , \quad (2.47)$$

$$\sum_{M_1, M_2, m_f, m_i} \theta^j(2, 1) \theta^{j'}(1, 2) = [j, j']^{1/2} (-1)^{2j'+L_1+L_2} \begin{pmatrix} j_f & j' & L_1 \\ j_i & j & L_2 \end{pmatrix} \quad ,$$

conduz à expressão final da taxa de decaimento

$$\begin{aligned}
 \frac{d\bar{W}}{d\omega_1} &= \frac{\omega_1\omega_2}{(2\pi)^3 c^2 (2j_i + 1)} \sum_{L_1, \lambda_1, L_2, \lambda_2, j} \left[[S^j(2, 1)]^2 + [S^j(1, 2)]^2 + \right. \\
 &\quad \left. + 2 \sum_{j'} (-1)^{2j' + L_1 + L_2} [j, j']^{1/2} \begin{pmatrix} j_f & j' & L_1 \\ j_i & j & L_2 \end{pmatrix} S^j(2, 1) S^{j'}(1, 2) \right] \\
 &= \sum_{L_1, \lambda_1, L_2, \lambda_2} \frac{d\bar{W}^{\lambda_1 L_1 \lambda_2 L_2}}{d\omega_1} .
 \end{aligned} \tag{2.48}$$

A expressão (2.48) pode ser, por sua vez, expressa em termos de multipolos eléctricos (E) e/ou magnéticos (M),

$$\frac{d\bar{W}^{\Theta_1 L_1 \Theta_2 L_2}}{d\omega_1} = \sum_{\lambda_{\Theta_1} \lambda_{\Theta_2}} \frac{d\bar{W}^{\lambda_1 L_1 \lambda_2 L_2}}{d\omega_1} , \tag{2.49}$$

em que

$$\begin{cases} \lambda_{\Theta} = -1, 1 & \text{se } \Theta = E \\ \lambda_{\Theta} = 0 & \text{se } \Theta = M \end{cases} . \tag{2.50}$$

Um critério que atesta a precisão do cálculo das probabilidades de transição é a concordância entre as diversas *gauges* G tal como foi referido anteriormente. Este critério só pode ser utilizado nas transições com contribuições eléctricas visto que só estas contribuições é que são afectadas pelo factor, $\lambda_{\Theta} = -1$. Consequentemente a concordância entre as diversas *gauges* G é verificada se $d\bar{W}^{\lambda_1 L_1 \lambda_2 L_2}/d\omega_1 = 0$ quando λ_1 ou λ_2 tem um valor igual a -1 .

Finalmente a taxa de emissão total é dada pela soma de todas as contribuições multipolares

$$\frac{dW}{d\omega_1} = \frac{1}{2} \sum_{\Theta_1 L_1 \Theta_2 L_2} \frac{d\bar{W}^{\Theta_1 L_1 \Theta_2 L_2}}{d\omega_1} . \tag{2.51}$$

O factor $1/2$ é incluído de modo a evitar contar cada par duas vezes quando ambos os fótons têm as mesmas características, como por exemplo a contribuição $2E1$.

Considerando o cálculo de uma só multipolaridade, que se utilizou funções de onda exactas, a expressão (2.49) pode ser representada por

$$\bar{W}^{\Theta_1 L_1 \Theta_2 L_2} = \frac{1}{2} \int_0^{\omega_t} \frac{d\bar{W}^{\lambda_1 L_1 \lambda_2 L_2}}{d\omega_1} d\omega_1 . \tag{2.52}$$

Salienta-se que o cálculo de contribuições com multipolaridade simétrica, como por exemplo $E1M2 \leftrightarrow M2E1$, equivale a trocar os índices superiores na expressão (2.52),

$$W^{\Theta_2 L_2 \Theta_1 L_1} = \frac{1}{2} \int_0^{\omega_t} \frac{d\bar{W}^{\lambda_2 L_2 \lambda_1 L_1}}{d\omega_1} d\omega_1 \quad . \quad (2.53)$$

Note-se que se permutar $1 \leftrightarrow 2$ na expressão (2.48) a função permanece inalterável. Logo, a expressão (2.53) assume a forma

$$W^{\Theta_2 L_2 \Theta_1 L_1} = \frac{1}{2} \int_0^{\omega_t} \frac{d\bar{W}^{\lambda_1 L_1 \lambda_2 L_2'}}{d\omega_1} d\omega_1 \quad , \quad (2.54)$$

com $d\bar{W}^{\lambda_1 L_1 \lambda_2 L_2'}/d\omega_1$ dado exactamente por (2.48) com as frequências trocadas; $\omega_1 \rightarrow \omega_2$ e $\omega_2 \rightarrow \omega_1$. Uma vez que as duas frequências se relacionam através de $\omega_1 = \omega_t - \omega_2$, o valor do integral de (2.52) em relação a ω_1 é igual a (2.54) em relação a ω_2 (trocando a variável de integração por ω_2), ou seja

$$W^{\Theta_1 L_1 \Theta_2 L_2} = W^{\Theta_2 L_2 \Theta_1 L_1} \quad . \quad (2.55)$$

Deste modo, uma vez calculada a taxa de emissão para um termo $\Theta_1 L_1 \Theta_2 L_2$, o respectivo termo simétrico $\Theta_2 L_2 \Theta_1 L_1$ não necessita de ser calculado. Usando este resultado, a taxa total pode ser rescrita como

$$\frac{dW}{d\omega_1} = \sum_{\substack{\Theta_1 L_1 \Theta_2 L_2 \\ \text{excepto termos} \\ \text{simétricos}}} t_{\Theta_1 L_1 \Theta_2 L_2} \frac{d\bar{W}^{\Theta_1 L_1 \Theta_2 L_2}}{d\omega_1} \quad , \quad (2.56)$$

onde

$$t_{\Theta_1 L_1 \Theta_2 L_2} = \begin{cases} 1 & \text{se } \Theta_1 L_1 \neq \Theta_2 L_2 \\ 1/2 & \text{se } \Theta_1 L_1 = \Theta_2 L_2 \end{cases} \quad .$$

2.2 Resolução da equação radial de Dirac

A equação radial de Dirac que descreve um electrão no campo nuclear pode ser escrita como [19]

$$\begin{bmatrix} V(r) & c \left(\frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r} \right) \\ -c \left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} \right) & -2mc^2 + V(r) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_\kappa \\ Q_\kappa \end{bmatrix} = \varepsilon \begin{bmatrix} P_\kappa \\ Q_\kappa \end{bmatrix} \quad , \quad (2.57)$$

onde $V(r)$ é o potencial nuclear, P_κ e Q_κ a componente grande e pequena respectivamente e κ definido da seguinte forma

$$\kappa = \begin{cases} -(j + \frac{1}{2}), & \text{se } l = j - \frac{1}{2} \\ +(j + \frac{1}{2}), & \text{se } l = j + \frac{1}{2} \end{cases} \quad (2.58)$$

Considerou-se que a carga está uniformemente distribuída no núcleo. Deste modo, o potencial em unidades atômicas é definido por

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Z}{2R_N} \left(3 - \frac{r^2}{R_N^2}\right) & r \leq R_N \\ -\frac{Z}{r} & r > R_N \end{cases} \quad (2.59)$$

em que o raio nuclear é relacionado com o do valor do peso atômico da seguinte forma

$$R_N = 2.2677 \times 10^{-5} \sqrt[3]{A} \quad . \quad (2.60)$$

Não se considerou o modelo de carga pontual dado que para camadas interiores, como em particular a camada s , as funções P_k e Q_k tem uma parte significativa no núcleo para valores de carga nuclear elevados ($Z \geq 40$).

De modo a facilitar a comparação com cálculos não relativistas considerou-se $\varepsilon = E - mc^2$. Desta forma, os estados no contínuo negativo tem energias com valor $\varepsilon < -mc^2$ enquanto as energias de valor $-mc^2 < \varepsilon < 0$ correspondem aos estados ligados positivos e as energias $\varepsilon > 0$ correspondem a estados no contínuo positivo.

O método usado neste trabalho para resolver a equação (2.57) é o chamado método de Galerkin. Segundo este método as equações que se pretende resolver são expressas por um funcional e por sua vez o integral de acção que se pretende minimizar (2.57) é expandido numa base completa de funções[18].

No presente caso multiplicando à direita de (2.57) por $[P_\kappa \ Q_\kappa]$ e integrando segundo o raio vem

$$\begin{aligned} L &= \int_0^R [cP_\kappa(r) (d/dr - k/r) Q_\kappa(r) - cQ_\kappa(r) (d/dr + k/r) P_\kappa(r) \\ &\quad + V(r) (Q_\kappa(r)^2 + P_\kappa(r)^2) - 2mc^2 Q_\kappa(r)^2] dr - \varepsilon \int_0^R [Q_\kappa(r)^2 + P_\kappa(r)^2] dr \\ &= L_A + L_B \quad . \end{aligned} \quad (2.61)$$

Do ponto de vista variacional o parâmetro ε , denominado multiplicador de Lagrange, assegura a normalização das funções de onda, ou seja,

$$\int_0^R [Q_\kappa(r)^2 + P_\kappa(r)^2] dr = 1 \quad . \quad (2.62)$$

O principio variacional, $\delta L = 0$, juntamente com as restrições

$$\delta P(0) = \delta P(R) = \delta Q(0) = \delta Q(R) = 0 \quad , \quad (2.63)$$

conduz a (2.57) sem qualquer restrição nas soluções devido a condições de fronteira [19]. Podem ser impostas condições de fronteira específicas através da remoção das condições (2.63) e a adição de um termo apropriado ao integral de acção L .

No caso presente adicionou-se a L o termo L' dado por[19]

$$L' = \begin{cases} \frac{c}{4} [P_\kappa(R)^2 - Q_\kappa(R)^2] + \frac{c}{2} P_\kappa(0)^2 - \frac{c}{2} P_\kappa(0) Q_\kappa(0) & k < 0 \\ \frac{c}{4} [P_\kappa(R)^2 - Q_\kappa(R)^2] + \frac{c^2}{2} P_\kappa(0)^2 - \frac{c}{2} P_\kappa(0) Q_\kappa(0) & k > 0 \end{cases} . \quad (2.64)$$

O cálculo variacional da combinação deste termo com (2.61), ou seja $\delta(L + L')$, resulta num termo que quando é nulo implica que as soluções P_κ e Q_κ satisfazem a equação (2.57) quando sujeitas às seguintes condições de fronteira

$$\begin{aligned} P_\kappa(0) &= 0 \\ P_\kappa(R) &= Q_\kappa(R) \end{aligned} . \quad (2.65)$$

Esta última condição de fronteira é conhecida como "MIT- bag-model" (Massachusetts Institute of Technology) e é equivalente, do ponto de vista relativista, à condição da função de onda estar confinada numa caixa $R_{n,l}(R) = 0$.

Como foi referido anteriormente expande-se as funções $P_\kappa(r)$ e $Q_\kappa(r)$ em termos de uma base completa de funções B-splines $B_i(r)$.

$$P(r) = \sum_{i=1}^n p_i B_i(r) \quad (2.66)$$

$$Q(r) = \sum_{i=1}^n q_i B_i(r) . \quad (2.67)$$

Omitiu-se o índice κ por simplicidade de notação. A resolução de (2.57) consiste em obter as energias ε associada a um índice κ e o valor dos coeficientes p_i e q_i , $i = 1, \dots, n$ associados a essa energia. Ao inserir (2.66) e (2.67) em (2.61) e em (2.64) obtêm-se $p_i \cdot q_i$, q_i^2 e p_i^2 .

O princípio variacional conduz ao seguinte sistema de equações algébricas:

$$\begin{bmatrix} \frac{d(L+L')}{dp_i} \\ \frac{d(L+L')}{dq_i} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad i = 1, \dots, n . \quad (2.68)$$

Estas equações podem ser expressas como um problema a valores próprios geral

$$Av = \varepsilon Bv , \quad (2.69)$$

em que v é um vector $2n$ dados por

$$v = (p_1, p_2, \dots, p_n, q_1, q_2, \dots, q_n) , \quad (2.70)$$

e onde A e B são matrizes $2n \times 2n$ dado por

$$A = \begin{bmatrix} (V) & c \left(D - \left(\frac{\kappa}{r} \right) \right) \\ -c \left(D + \left(\frac{\kappa}{r} \right) \right) & -2mc^2 + V \end{bmatrix} + A' \quad (2.71)$$

$$B = \begin{bmatrix} (C) & 0 \\ 0 & (C) \end{bmatrix} . \quad (2.72)$$

A matriz A resulta do termo L_A enquanto a matriz B resulta de L_B

A matriz A' $2n \times 2n$ resulta da contribuição das condições de fronteira, ou seja, do termo (2.64)

$$A'_{ij} = \begin{cases} c\delta_{i,1}\delta_{j,1} - \frac{c}{2}\delta_{i,1}\delta_{j,n+1} - \frac{c}{2}\delta_{i,n+1}\delta_{j,1} \\ + \frac{c}{2}\delta_{i,n}\delta_{j,n} - \frac{c}{2}\delta_{i,2n}\delta_{j,2n} & k < 0 \\ 2c^2\delta_{i,1}\delta_{j,1} - \frac{c}{2}\delta_{i,1}\delta_{j,n+1} - \frac{c}{2}\delta_{i,n+1}\delta_{j,1} \\ + \frac{c}{2}\delta_{i,n}\delta_{j,n} - \frac{c}{2}\delta_{i,2n}\delta_{j,2n} & k > 0 \end{cases} . \quad (2.73)$$

As matrizes (C) , (D) , (V) e (k/r) são matrizes $n \times n$ dadas por:

$$(C)_{ij} = \int B_i(r)B_j(r)dr ; \quad (2.74)$$

$$(D)_{ij} = \int B_i(r)\frac{d}{dr}B_j(r)dr ; \quad (2.75)$$

$$(V)_{ij} = \int B_i(r)V(r)B_j(r)dr ; \quad (2.76)$$

$$\left(\frac{k}{r} \right)_{ij} = \int B_i(r)\frac{\kappa}{r}B_j(r)dr . \quad (2.77)$$

Como se pode constatar as matrizes (C) , (V) e (k/r) são simétricas. Os elementos da matriz (D) verificam a relação

$$(D)_{ij} = [B_i(r)B_j(r)]_0^R - (D)_{ji} . \quad (2.78)$$

Na base considerada, B-splines, verifica-se que para os elementos não diagonais e elementos diagonais da matriz (D)

$$(D)_{ij} = -(D)_{ji} \quad (2.79)$$

$$(D)_{ii} = 0 .$$

Deste modo, as matrizes A e B são simétricas o que permite o uso de rotinas que resolvam o problema de valores próprios (2.69) optimizadas para esse tipo de matrizes.

Ao resolver a equação (2.69) obtêm-se $2n$ valores próprios ε_k e $2n$ funções próprias.

B-splines

Considerando a notação seguida em [18], divide-se o intervalo de $r = 0$ até $r = R$ em segmentos. Os pontos finais de cada segmento definem uma "rede" $\{t_i\}$, $i = 1, 2, \dots$

Um B-spline de ordem i de grau k podem ser definidos por recorrência da seguinte forma:

$$B_{i,1}(x) = \begin{cases} 1 & t_i \leq x \leq t_{i+1} \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (2.80)$$

$$B_{i,k}(x) = \frac{x - t_i}{t_{i+k-1} - t_i} B_{i,k-1}(x) + \frac{t_{i+k} - x}{t_{i+k} - t_{i+1}} B_{i+1,k-1}(x) \quad . \quad (2.81)$$

Um B-spline de ordem i e grau k é um polinómio de grau $k-1$ definido num intervalo $[t_i, t_{i+k}]$ que tem valor nulo em todo o espaço excepto nesse intervalo. Os pontos da rede dos B-splines tem multiplicidade k nos extremos, isto é, $t_1 = t_2 = \dots t_k = 0$ e $t_{n+1} = t_{n+2} = \dots t_{n+k} = R$. Como exemplo, considere-se a rede $t_1 = t_2 = t_3 = 0$, $t_i = (i-3)$, $i = 4, \dots, 8$ e $t_9 = t_{10} = t_{11} = 6$. Os pontos extremos têm multiplicidade 3 de modo a que o primeiro e último B-spline estejam definidos dentro do intervalo considerado. Na Figura (2.2) estão representados oito B-splines de grau 3 associados a essa rede t_i , $i = 1, \dots, 11$.

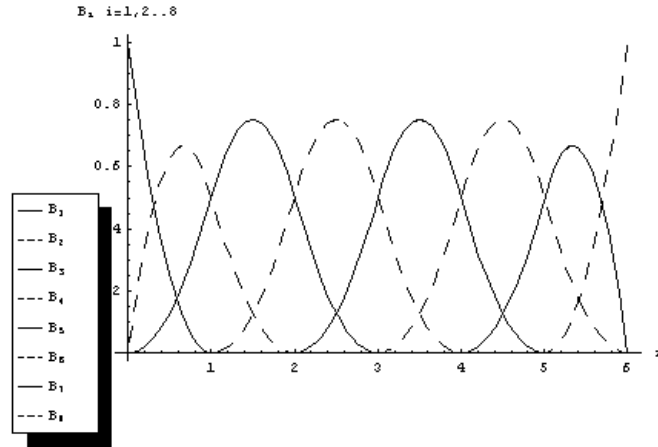


Figura 2.2: Representação de oito B-splines de ordem $k = 3$.

Como se pode observar cada B-spline i está definido no intervalo $[t_i, t_{i+k}]$ tendo valor nulo fora desse intervalo. Verifica-se que em cada ponto a soma dos três B-splines de valor não nulo ($k = 3$) tem valor 1. Multiplicando cada B-spline pelo coeficiente apropriado pode-se aproximar qualquer função contínua a uma base de B-splines. No exemplo acima considerou-se 8 B-splines de grau três, $k = 3$, definidos numa rede

uniforme enquanto neste trabalho usou-se 59 B-splines. Dado que os zeros das funções de onda se encontram próximos do núcleo convém ter mais pontos de integração nessa zona para ter mais precisão de cálculo. Deste modo usou-se uma rede definida entre $r = 0$ e $r = R = 40$ em que os pontos se distribuem exponencialmente. Optou-se por trabalhar com B-splines de grau $k = 9$ visto que a partir desta ordem a variação dos resultados é da ordem de 10^{-7} .

Como se pode observar da Figura (2.2) cada B-spline i só intersecta com dois B-splines à esquerda ($i - 2, i - 1$) e à direita ($i + 1, i + 2$). Devido a este facto, a solução numérica da equação a valores próprios geral (2.69) pode ser obtida com grande precisão independentemente da dimensão da base escolhida (número de B-splines); esta é uma vantagem na escolha dos B-splines.

2.3 Considerações sobre o cálculo teórico da transição a dois fótons entre dois estados genéricos (n, l, j)

Constata-se que por forma a generalizar a expressão (2.48) de forma a ser aplicável no cálculo de outras transições é necessário incluir os seguintes termos:

É necessário introduzir um termo que represente de uma forma explícita a paridade, Π^l , para determinar os estados intermédios sem ambiguidade nas grandezas $S^j(2, 1)$ e $S^j(1, 2)$ da expressão (2.48), principalmente quando os números quânticos angulares l e j não são os mesmos nos estados final e inicial. Este termo é incluído na expressão (2.43) da seguinte forma;

$$S^j(2, 1) = \sum_l \sum_{n_l} \frac{\bar{M}_{f, n_l}^{(\lambda_2, L_2)}(\omega_2) \bar{M}_{n_l, i}^{(\lambda_1, L_1)}(\omega_1)}{E_{n_l} - E_i + \omega_1} \Delta^j(2, 1) \Pi^l(2, 1) \quad , \quad (2.82)$$

onde

$$\Pi^l(2, 1) = \pi_f^l(2) \pi_i^l(1) \quad , \quad (2.83)$$

com

$$\pi_n^l(t) = \begin{cases} 1 & \text{se } l_n + l + L_t + \lambda_t + 1 = \text{par} \\ 0 & \text{se } l_n + l + L_t + \lambda_t + 1 = \text{impar} \end{cases} \quad , \quad (2.84)$$

e $n = i, f$.

Se a energia de um estado intermédio E_n é igual a $(E_i - \omega_k)$ no denominador (2.43) (com $k = 1, 2$), a taxa de emissão espontânea tem um comportamento ressonante para essa energia E_n . Fisicamente, esse comportamento acontece quando um estado intermédio virtual entre os estados inicial e final, coincide com um estado real.

A equação (2.48) não é aplicável na proximidade de uma ressonância ω_j , uma vez que se considerou que $|i\rangle$, $|f\rangle$, e $|n\rangle$ são estados estacionários, isto é, com uma dependência temporal dada por $\exp(-iE_n t/\hbar)$. Nesta situação considera-se que a dependência do nível n é dada por $\exp[-i(E_n - i\Gamma_n)t/\hbar]$, em que Γ_n é a largura do nível n . Fisicamente, esta aproximação tem em conta o facto do nível n poder decair devido a emissão espontânea. Este formalismo, chamado de Fano, pode ser visto em mais detalhe em [21]. A expressão correspondente à expressão (2.29) para a taxa de emissão diferencial é a seguinte

$$\frac{dw}{d\omega_1} = \frac{\omega_1\omega_2}{(2\pi)^3 c^2} \left| \sum_n \frac{\langle f|A_2^*|n\rangle \langle n|A_1^*|i\rangle}{E_n - E_i + \omega_1 - i\Gamma_n/2} + \frac{\langle f|A_1^*|n\rangle \langle n|A_2^*|i\rangle}{E_n - E_i + \omega_2 - i\Gamma_n/2} \right|^2 d\Omega_1 d\Omega_2 \quad , \quad (2.85)$$

Uma dedução similar à utilizada para obter (2.48) a partir de (2.29) leva a

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{W}^r}{d\omega_1} &= \frac{\omega_1\omega_2}{(2\pi)^3 c^2 (2j_i + 1)} \sum_{L_1, \lambda_1, L_2, \lambda_2, j} \left[\left| \bar{S}^j(2, 1) \right|^2 + \left| \bar{S}^j(1, 2) \right|^2 + \right. \\ &\quad + \sum_{j'} (-1)^{2j' + L_1 + L_2} [j, j']^{1/2} \begin{pmatrix} j_f & j' & L_1 \\ j_i & j & L_2 \end{pmatrix} \\ &\quad \times \bar{S}^j(2, 1) [\bar{S}^{j'}(1, 2)]^* + [\bar{S}^j(2, 1)]^* \bar{S}^{j'}(1, 2) \Big] \\ &= \sum_{L_1, \lambda_1, L_2, \lambda_2} \frac{d\bar{W}_r^{\lambda_1 L_1 \lambda_2 L_2}}{d\omega_1}. \end{aligned} \quad (2.86)$$

$\bar{S}^j(2, 1)$ é definido como em (2.43) com $E_{n_l} \rightarrow E_{n_l} - i\Gamma_{n_l}/2$, isto é

$$\bar{S}^j(2, 1) = \sum_l \sum_{n_l} \frac{\bar{M}_{f, n_l}^{(\lambda_2, L_2)}(\omega_2) \bar{M}_{n_l, i}^{(\lambda_1, L_1)}(\omega_1)}{E_{n_l} - E_i + \omega_1 - i\Gamma_n/2} \Delta^j(2, 1) \Pi^l(2, 1) \quad . \quad (2.87)$$

Como a transição $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ não tem nenhum nível intermédio real, este termo não é necessário nesta transição.

Realça-se que a expressão (2.29) não é integrável, sem a inclusão de uma frequência complexa, uma vez que

$$\int_0^1 \frac{1}{|a - \omega + i\varepsilon|^2} d\omega = \frac{\pi}{\varepsilon} + \frac{1}{a(a-1)} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad , \quad (2.88)$$

como foi referido por Jentschura [20]. Nesse trabalho foi obtida uma expressão para o cálculo de transição a dois fótons através da parte imaginária da auto-energia (interacção do electrão com o vácuo do campo electromagnético) com dois loops. Nesse

caso obtêm-se uma expressão integrável uma vez que os denominadores são expressos de acordo com

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \operatorname{Re} \int_0^1 \frac{1}{(a - \omega + i\varepsilon)^2} d\omega = \frac{1}{a(a-1)} \quad , \quad (2.89)$$

O comportamento ressonante dos denominadores está directamente relacionado com a estrutura da função de Green $S_c^{(e)}$ (2.16) que contém denominadores $E_n - \omega$. Espera-se que a substituição pela função de Green exacta que tenha em conta a interacção total entre o electrão e o campo electromagnético, ou seja, que tenha em conta correcções radiativas, conduza a resultados finitos.

Uma demonstração de uma função de Green aproximada que tenha em conta correcções radiativas pode ser encontrada em [14] (secção 53.4).

$$S_c^{(e)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \approx \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\omega(t_2 - t_1)) \sum_n \frac{\psi_n(\mathbf{r}_2) \bar{\psi}_n(\mathbf{r}_1)}{E_n + \omega - H_{nn}(-\omega)} d\omega \quad , \quad (2.90)$$

onde

$$H_{nn}(-\omega) = \delta E_n - i\Gamma_n/2 \quad . \quad (2.91)$$

Este valor $H_{nn}(-\omega)$ é o resultado de uma correcção em primeira ordem à energia E_n resultante de um termo associado à auto-energia incluído na equação de Dirac num campo externo. Este campo externo tem em conta a polarização do vazio (interacção dos fótons com o vácuo do campo electrões-positrões).

Uma vez que não foi considerada os desvios de energia, δE_n , nos estados intermédios, ao incluir esta função de Green em (2.13) resulta na expressão (2.85).

Capítulo 3

Implementação computacional do modelo estudado

Nesta secção descreve-se o programa em linguagem Fortran, e as respectivas rotinas, que foi desenvolvido para se efectuar o cálculo da expressão (2.86). Este programa, que se encontra no CD em anexo, segue o fluxograma representado na Figura 3.1.

Nas rotinas "input" e "definições" define-se e atribui-se os valores às grandezas a partir das quais o programa inicia o cálculo. Estas grandezas são indicadas, caso seja necessário, nas subsecções seguintes.

3.1 Resolução da equação de Dirac

Nesta etapa do cálculo obtêm-se as energias e funções próprias para vários valores do número quântico κ . As rotinas que fazem parte desta etapa são as seguintes: **mkgridm**, **inspl**, **setmat** e **eigens_df**. O Fluxograma desta etapa do cálculo está representa na Figura 3.2.

De modo a resolver a equação de Dirac radial para um dado κ é necessário calcular as seguintes matrizes, (2.74)-(2.77).

A rotina **mkgridm** define a rede exponencial na qual os B-splines estão definidos. A rotina **inspl** define os pontos de Gauss entre cada ponto da rede necessários para obter os valores das matrizes (C) , (D) , (V) e (κ/r) por integração de Gauss-Legendre. A rotina **setmat** executa o cálculo das matrizes (2.74), (2.75), (2.76) e (2.77) por integração de Gauss-Legendre.

A rotina **eigens_df** constrói as matrizes A e B a partir das matrizes (2.74), (2.75), (2.76), (2.77) e da matriz das condições de fronteira A' de acordo com (2.71) e (2.72), para um dado valor de κ , e resolve a equação aos valores próprios geral (2.69), mediante a utilização da rotina **rsg** da EISPACK (Eigenvalue/Eigenvector System

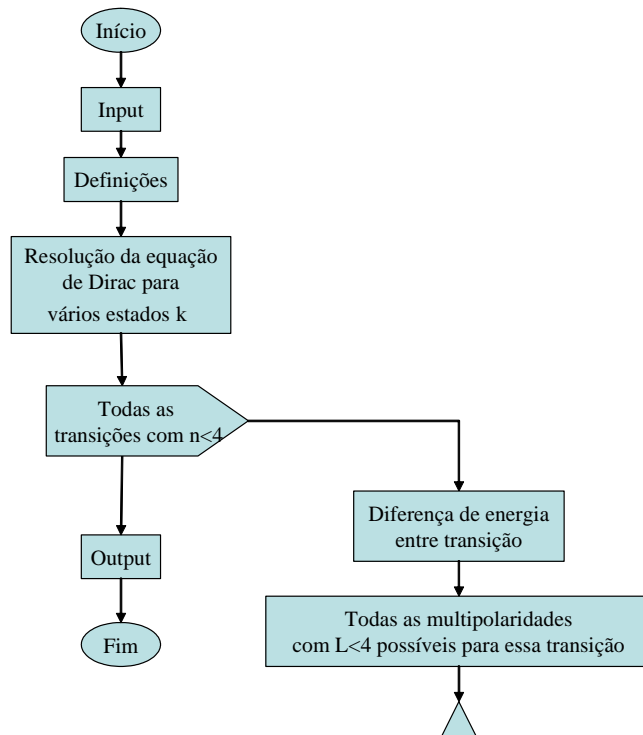


Figura 3.1: Fluxograma do programa de cálculo da taxa de emissão espontânea para diversas transições

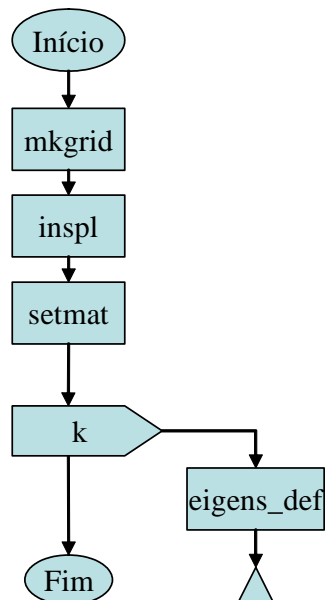


Figura 3.2: Fluxograma da etapa do cálculo referente à obtenção dos valores próprios e funções próprias da equação radial de Dirac.

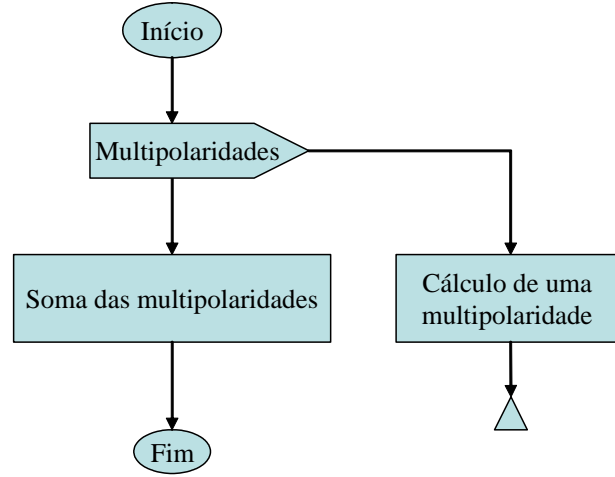


Figura 3.3: Fluxograma da etapa do cálculo referente ao cálculo das diversas multipolaridades.

PACKage).

Pretendeu-se utilizar uma versão actual dessa rotina contida na versão moderna da EISPACK, a LAPACK (Linear Algebra PACKage) e tal não foi conseguido porque essa rotina, **dsygv**, não é reconhecida pelo compilador utilizado (Compaq Visual Fortran) o qual só reconhece algumas rotinas da LAPACK.

Obtêm-se deste modo, para cada valor de κ , as energias (2.69) e funções próprias necessárias (2.66) (2.67) da resolução de (2.69). Estas rotinas foram obtidas do trabalho anterior referido na referência [1].

Conhecendo os valores das energias dos níveis é possível efectuar o cálculo da frequência total de emissão ω_t ,

$$\omega_t = \omega_1 + \omega_2 \quad , \quad (3.1)$$

de uma transição $E_{n_i l_i j_i} \rightarrow E_{n_f l_f j_f}$ através de (3.2)

$$\omega_t = E_{n_i l_i j_i} - E_{n_f l_f j_f} \quad . \quad (3.2)$$

3.2 Cálculo de todas as multipolaridades

Nesta secção do cálculo obtêm-se o valor da taxa total de decaimento através da expressão (2.51). Tal como está representado na Figura 3.3, o programa calcula o valor da taxa de decaimento para cada contribuição multipolar individualmente e no fim efectua o somatório.

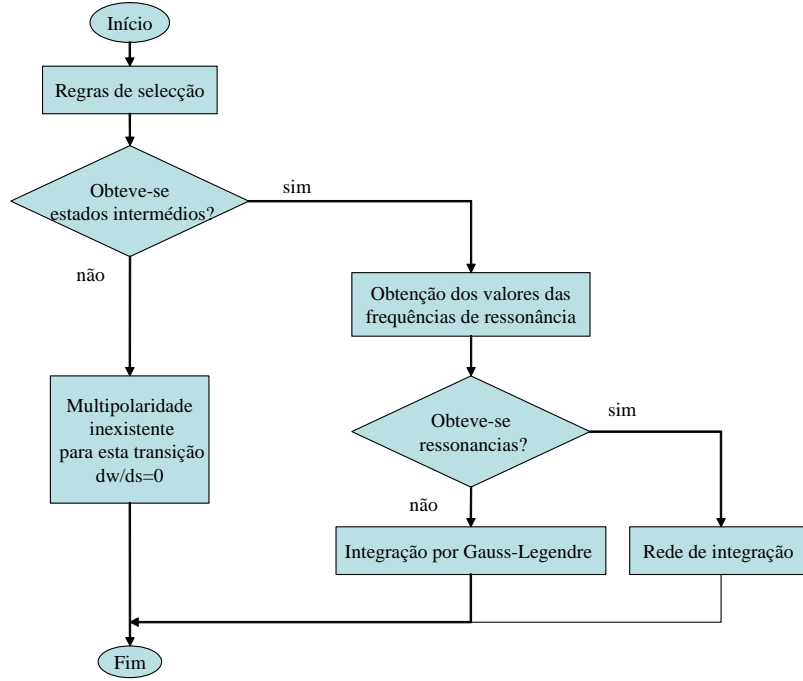


Figura 3.4: Fluxograma do cálculo de uma multipolaridade.

No ciclo em relação às multipolaridades não se efectua o cálculo das contribuições simétricas tal como foi referido anteriormente em (2.56).

3.2.1 Cálculo de uma multipolaridade

O fluxograma do cálculo de uma contribuição multipolar encontra-se na Figura 3.4.

O algoritmo começa por obter os estados intermédios não nulos para o cálculo de $S^j(2,1)$ e $S^j(1,2)$, que são permitidos pelas regras de selecção

$$|j_i - j_f| \leq L \leq j_i + j_f \quad (3.3)$$

$$P_i = P_f P \quad , \quad (3.4)$$

com

$$P = (-1)^{L+\lambda+1} \quad , \quad (3.5)$$

e a paridade de cada nível é dada por

$$P_i = (-1)^{l_i} \quad (3.6)$$

$$P_f = (-1)^{l_f} \quad .$$

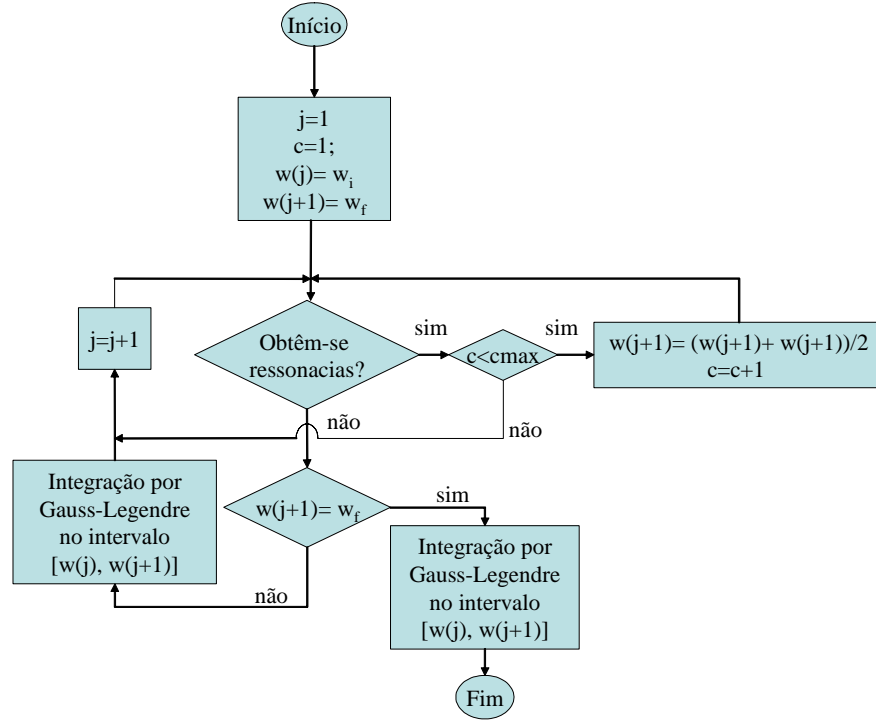


Figura 3.5: Fluxograma da rede de integração.

Estas regras de selecção estão contidas nas expressões (2.44) e (2.83). Certas multipolaridades não são permitidas para uma dada transição, como por exemplo a contribuição $E1M1$ na transição $2s \rightarrow 1s$. Nesse caso o algoritmo não retorna qualquer estado intermédio. Caso contrário, o programa segue para o cálculo dos valores das frequências de ressonâncias. Ao detectar uma frequência o programa atribui automaticamente o valor da largura do nível, Γ_n , ao nível n do estado intermédio. Se se detectar pelo menos uma ressonância, a integração da expressão (2.49) é efectuada usando uma rede de integração. Caso contrário, é efectuada usando o método de Gauss-Legendre.

3.2.2 Rede de integração

O fluxograma usado para definir uma rede de integração está representado na Figura 3.5.

A rede de integração define uma rede dinâmica na qual nas vizinhanças de uma ressonância são definidos mais intervalos de integração por Gauss-Legendre de modo a ter em conta o aumento súbito da função nessa zona. No cálculo efectuado considerou-se $c_{max} = 30$, dado que para valor a variação nos resultados é da ordem de 10^{-6} .

3.2.3 Integração usando o método de Gauss- Legendre

No método de Gauss-Legendre um integral de uma função f pode ser aproximado através da expressão

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x)dx = \sum_{i=1}^N w_i f(x_i) \quad . \quad (3.7)$$

Os valores de x_i , chamados pontos de Gauss, são os zeros dos polinómios de Legendre P_l

$$P_l(x) = \sum_{n=0}^{l-1} a_n x^n \quad , \quad (3.8)$$

onde

$$\begin{aligned} a_2 &= -\frac{l(l+1)}{2}a_0 \quad , \\ a_3 &= -\frac{(l(l+1)-2)}{6}a_1 \quad , \\ a_{n+2} &= \frac{n(n+1)-l(l+1)}{(n+2)(n+1)}a_n \quad . \end{aligned} \quad (3.9)$$

Os pesos w_i tem valor igual a

$$w_i = \frac{2}{(1-x_i^2)P'_N(x_i)} \quad . \quad (3.10)$$

Este método é bastante flexível no caso de haver conhecimento do valor da função nos pontos x_i . Esta fórmula é usada na integração em frequência da expressão da taxa de decaimento (2.48) e nos integrais radiais (2.42).

3.3 Integração em frequência

De modo a efectuar a integração num dado intervalo $[\omega(j), \omega(j+1)]$ efectua-se um ciclo num índice i de modo a que $\omega_1(i)$ sejam os pontos de Gauss entre $\omega(j)$ e $\omega(j+1)$. A frequência do segundo fotão $\omega_2(i)$ tem valor igual a

$$\omega_2(i) = \omega_t(i) - \omega_1(i) \quad . \quad (3.11)$$

Na Figura 3.6 encontra-se o fluxograma do cálculo da expressão (2.86) para uma frequência ω_1 e termo $\lambda_1 L_1 \lambda_2 L_2$.

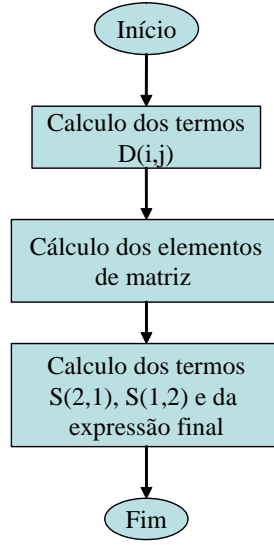


Figura 3.6: Fluxograma do cálculo de Expressão (2.86) para uma frequência ω_1 e termo $\lambda_1 L_1 \lambda_2 L_2$.

Os elementos de matriz representados na expressão (2.41) são combinações lineares de integrais da seguinte forma

$$\begin{aligned}
 & \int_0^\infty P(r)Q(r)j_L\left(\frac{\omega r}{c}\right) dr \\
 & \int_0^\infty P(r)P(r)j_L\left(\frac{\omega r}{c}\right) dr \\
 & \int_0^\infty Q(r)Q(r)j_L\left(\frac{\omega r}{c}\right) dr \quad .
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

Considerando o primeiro caso de (3.12), e substituindo a solução de P e Q pela expansão na base de B-splines, (2.66) e (2.67), vem

$$\begin{aligned}
 \int_0^\infty P(r)Q(r)j_L\left(\frac{\omega r}{c}\right) dr &= \\
 &= \int_0^\infty \sum_{i=1}^n p_i B_i(r) \cdot \sum_{j=1}^n q_j \cdot B_j(r) j_L\left(\frac{\omega r}{c}\right) dr \\
 &= \sum_{i=1}^n p_i \sum_{j=1}^n q_j \int_0^\infty B_i(r) B_j(r) j_L\left(\frac{\omega r}{c}\right) dr \\
 &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n p_i q_j D_{ij}^L \quad .
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

De modo tornar o código mais eficiente, calcula-se os termos D_{ij}^L e posteriormente multiplica-se o resultado obtido pelos respectivos coeficientes. Em seguida efectua-se

o cálculo de todos os elementos de matriz necessários para a obtenção da expressão (2.87). Finalmente os valores dos elementos de matriz são usados no cálculo das expressões $\text{Re} [S^j(2, 1)]$, $\text{Im} [S^j(2, 1)]$, $\text{Re} [S^j(1, 2)]$, $\text{Im} [S^j(1, 2)]$ e $d\overline{W}/d\omega_1$.

Capítulo 4

Análise dos resultados obtidos

A estabilidade e precisão do cálculo da expressão (2.86) para uma dada frequência ω_1 são verificados quer em termos da invariância de *gauge* sem inclusão de Γ_n , quer em termos de variação do raio de integração R e dos parâmetros da base: o número de B-splines (ns) usado e o grau de B-splines (k). Os parâmetros usados neste cálculo foram $ns = 59$, e $k = 9$. O valor de R varia conforme a transição, sendo, por exemplo, $R = 40$ u.a. para a transição $2s \rightarrow 1s$ e $R = 60$ u.a. para $3d \rightarrow 1s$.

Foram incluídos todos os multipolos com $L \leq 3$ de modo a ter uma precisão de 6 casas decimais, isto é, a adição de uma contribuição multipolar de ordem superior não afecta o resultado final mesmo no caso de $Z = 92$. As contribuições multipolares mais significativas incluídas no cálculo da taxa de decaimento das transições $2p_{1/2} \rightarrow 1s$, $2p_{3/2} \rightarrow 1s$ e $3s \rightarrow 2s$ estão listadas nas Tabelas 4.1, 4.2 e 4.3. A magnitude das contribuições multipolares seguintes que não figuram nas tabelas são seis ordens de grandeza menores que as mais importantes.

Nas Tabelas 4.4 e 4.5 encontram-se listadas as taxas totais de decaimento a dois fótons para transições com o nível inicial igual a 2 e 3 respectivamente. Os resultados de Tung *et al* presentes na tabela foram obtidos das expressões analíticas presentes na referência [25].

De modo a representar a distribuição em frequência para vários valores de Z é conveniente expressar os resultados na forma sugerida por Spitzer e Greenstein [3].

$$\frac{dW}{dy} = \left(\frac{9}{2^{10}} \right) (\alpha Z)^n \psi(y, Z) \quad Ry \quad , \quad (4.1)$$

onde $y = \omega/\omega_t$ representa a fracção de energia de um dos fótons e $\psi(y, Z)$ o membro direito da expressão (2.86). No caso de uma transição par \rightarrow par (ou impar \rightarrow impar),

Tabela 4.1: Contribuições multipolares incluídas neste cálculo para a taxa de emissão espontânea da transição $2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$.

| Multípolos | Contribuição (s^{-1}) | | |
|------------|---------------------------|-----------------------|------------------------|
| | $Z = 1$ | $Z = 40$ | $Z = 92$ |
| $E1M1$ | 9.676654(−6) | 6.02775(7) | 3.876205(10) |
| | 9.667(−6) ^a | 6.020(7) ^a | 3.859(10) ^a |
| | 9.677(−6) ^b | 6.341(7) ^b | 4.966(10) ^b |
| $E1E2$ | 6.61179(−6) | 4.092489(7) | 2.373930(10) |
| | 6.605(−6) ^a | 4.088(7) ^a | 2.357(10) ^a |
| | 6.673(−6) ^b | 4.374(7) ^b | 3.425(10) ^b |
| $M1M2$ | 3.82787(−17) | 5.603055(2) | 7.750444(6) |
| $E2M2$ | 9.385470(−17) | 5.603055(3) | 2.863684(7) |
| $E2E3$ | 4.095985(−18) | 6.608612(1) | 1.177403(6) |
| Total | 1.628845(−5) | 1.012046(8) | 6.253891(10) |

^a Labzowsky *et al* [22]^b Labzowsky *et al* [23]Tabela 4.2: Contribuições multipolares incluídas neste cálculo para a taxa de emissão espontânea da transição $2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$.

| Multípolos | Contribuição (s^{-1}) | | |
|------------|---------------------------|--------------|---------------|
| | $Z = 1$ | $Z = 40$ | $Z = 92$ |
| $E1M1$ | 9.677309(−6) | 5.122127 (9) | 8.713192 (13) |
| $E1E2$ | 6.612242(−6) | 4.575854(7) | 5.852988 (10) |
| $E1M3$ | 1.761532(−16) | 3.264236(3) | 1.216566 (8) |
| $M1M2$ | 2.450145(−15) | 4.271650(4) | 2.388108 (9) |
| $E2M2$ | 7.227055(−17) | 1.338152(3) | 4.970281 (7) |
| $E2E3$ | 4.096369(−18) | 7.718214(1) | 1.216566 (8) |
| Total | 1.628955(−5) | 5.167932 (9) | 8.719302(13) |

Tabela 4.3: Contribuições multipolares incluídas neste cálculo para a taxa de emissão espontânea da transição $3s_{1/2} \rightarrow 2s_{1/2}$.

| Multípolos | Contribuição (s^{-1}) | | |
|------------|---------------------------|--------------|---------------|
| | $Z = 1$ | $Z = 40$ | $Z = 92$ |
| $2E1$ | 6.454122(-2) | 3.158228(8) | 1.847396 (12) |
| $E1M2$ | 6.727914(-14) | 1.142766(3) | 3.358184 (8) |
| $2M1$ | 1.038952(-14) | 1.241694(2) | 1.035879 (6) |
| $2E2$ | 1.456216(-14) | 1.584006(2) | 8.514901 (5) |
| $2M2$ | 1.901858(-27) | 6.056348(-5) | 4.533646 (3) |
| Total | 6.454122(-2) | 3.158242(8) | 1.847734 (12) |

Tabela 4.4: Taxa total de emissão espontânea de dois fótons (s^{-1}) para dois estados inicial e final genéricos com $n_i = 2$. Comparação dos resultados obtidos neste trabalho com todos os resultados teóricos publicados.

| Taxa total de decaimento, ω (s^{-1}) | | | | |
|---|-----------------|--------------|--|--------------|
| $Z = 1$ | $f \setminus i$ | $2s_{1/2}$ | $2p_{1/2}$ | $2p_{3/2}$ |
| | $1s_{1/2}$ | 8.229059 | 1.628845(-5) 1.6272(-5) ^a 1.6350(-5) ^b | 1.628955(-5) |
| $Z = 40$ | $f \setminus i$ | $2s_{1/2}$ | $2p_{1/2}$ | $2p_{3/2}$ |
| | $1s_{1/2}$ | 3.198907(10) | 1.012046(8) 1.010(8) ^a 1.071(8) ^b | 5.167932 (9) |
| $Z = 92$ | $f \setminus i$ | $2s_{1/2}$ | $2p_{1/2}$ | $2p_{3/2}$ |
| | $1s_{1/2}$ | 3.836350(12) | 6.253891(10) 6.216 (10) ^a 8.391(10) ^b | 8.719302(13) |

^a Labzowsky *et al* [22]^b Labzowsky *et al* [23]

Tabela 4.5: Taxa total de emissão espontânea de dois fótons (s^{-1}) para dois estados inicial e final genéricos com $n_i = 3$. Comparação dos resultados obtidos neste trabalho com todos os resultados teóricos publicados.

| Taxa total de decaimento, ω (s^{-1}) | | | | | | |
|---|------------------|---|--|---|---|----------------------------|
| $Z = 1$ | $f \backslash i$ | $3s_{1/2}$ | $3p_{1/2}$ | $3p_{3/2}$ | $3d_{3/2}$ | $3d_{5/2}$ |
| | $1s_{1/2}$ | 6.317921(6) 6.3(6) ^a | 2.406598(1) | 2.434389(1) | 6.466712(7) 6.5(7) ^a | 6.446629(7) |
| | $2s_{1/2}$ | 6.454122(-2) 6.4527(-2) ^b | 4.925766(-8) | 4.926337(-8) | 7.762448(-4) 7.7589(-4) ^b | 7.750009(-4) 7.7589(-4) |
| | $2p_{1/2}$ | 2.894793(-8) | 4.6601486(-2) 4.7484(-2) ^b | 4.414499(-4) | 3.890718(-8) | 3.049477(-9) |
| | $2p_{3/2}$ | 5.789453(-8) | 8.8326696(-4) | 4.704893(-2) 4.7484(-2) ^b | 1.326769(-8) | 4.912188(-8) |
| $Z = 40$ | $f \backslash i$ | $3s_{1/2}$ | $3p_{1/2}$ | $3p_{3/2}$ | $3d_{3/2}$ | $3d_{5/2}$ |
| | $1s_{1/2}$ | 1.916723(13) | 2.897227(13) | 2.664520(13) | 1.705607(14) | 1.650996(14) |
| | $2s_{1/2}$ | 3.158242(8) | 9.506933(5) | 7.045042(5) | 3.455210(8) | 1.121141(9) |
| | $2p_{1/2}$ | 2.488711(5) | 1.797446(8) | 5.032299(8) | 4.574162(5) | 9.352159(5) |
| | $2p_{3/2}$ | 3.349968(5) | 8.519784(6) | 1.398254(9) | 3.380043(5) | 3.306645(5) |
| $Z = 92$ | $f \backslash i$ | $3s_{1/2}$ | $3p_{1/2}$ | $3p_{3/2}$ | $3d_{3/2}$ | $3d_{5/2}$ |
| | $1s_{1/2}$ | 1.043821(15) | 2.323283(15) | 1.205796(15) | 5.450675(15) | 4.599581(15) |
| | $2s_{1/2}$ | 1.847734(12) | 3.161946(10) | 2.180972(10) | 3.806891(12) | 1.006273(13) |
| | $2p_{1/2}$ | 8.741115(9) | 2.343955(10) | 2.913740(12) | 8.543376(9) | 4.804652(10) |
| | $2p_{3/2}$ | 1.545336(8) | 5.341938(9) | 1.152498(13) | 1.387910(10) | 2.994209(9) |

^a Florescu [26]

^b Tung *et al* [25]

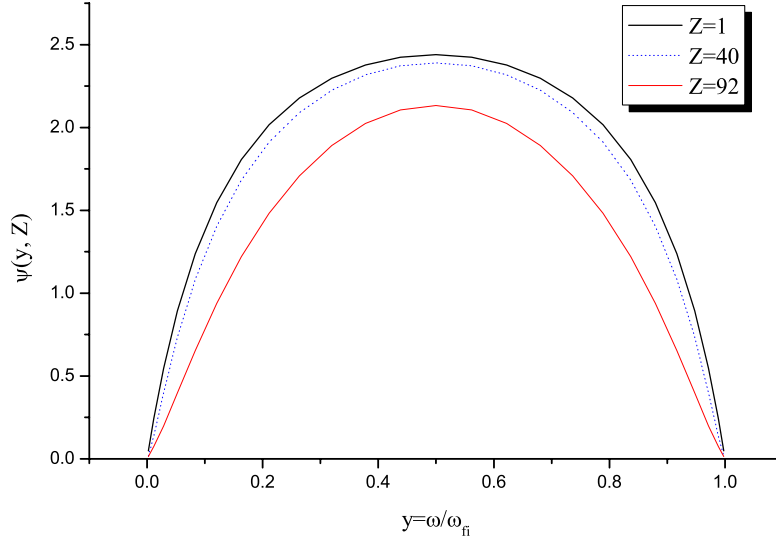


Figura 4.1: Distribuição em frequência $\psi(y)$ da transição $2s \rightarrow 1s$ para $Z=1, 40$, e 92 . A variável y representa a fracção de energia de um dos dois fotões.

como a transição $2s \rightarrow 1s$, a maior contribuição multipolar $2E1$ é proporcional a $(\alpha Z)^6$ e, conseqüentemente, $n = 6$. Para uma transição par \rightarrow ímpar (ou par \rightarrow ímpar) ambas as contribuições mais significativas $E1M1$ e $E1E2$ são proporcionais a $(\alpha Z)^8$.

Na Figura 4.1 está representada a distribuição em frequência da transição $2s \rightarrow 1s$ para $Z = 1, 40$ e 92 . Esta apresenta uma forma simétrica em torno do máximo, a metade da energia (quando ambos os fotões tem a mesma frequência), e tem valor nulo quando nos limites quando a frequência de um dos fotões é igual a 0.

Na distribuição em frequência da transição $3s \rightarrow 1s$, representada na Figura 4.2, nota-se certos aspectos que não estão presentes na distribuição correspondente a $2s \rightarrow 1s$. Em particular, para além dos zeros nos limites, constata-se mais dois zeros em $y = 0.2197$ e 0.7803 para os quais decaimentos a dois fotões não são possíveis para essas frequências. Estes mínimos, também designados transparências, foram também observados por Tung *et al* [25]. Na Tabela 4.6 estão listadas as transparências para várias transições obtidas neste trabalho e por outros autores [27, 28].

Para além disso, a distribuição $\psi_{3s \rightarrow 1s}(y, Z)$ exhibe picos "aguçados" em $y = 0.1562$ e $y = 0.8437$. Como foi mencionado na Secção (2.3), este comportamento é devido à ressonância resultante de um fotão com frequência correspondente à diferença de energia $E_{3s} - E_{2p}$ e outro com a diferença de energia $E_{2p} - E_{1s}$. Em $Z = 92$ observa-se que cada ressonância divide-se em duas e essa diferença de frequência é exactamente

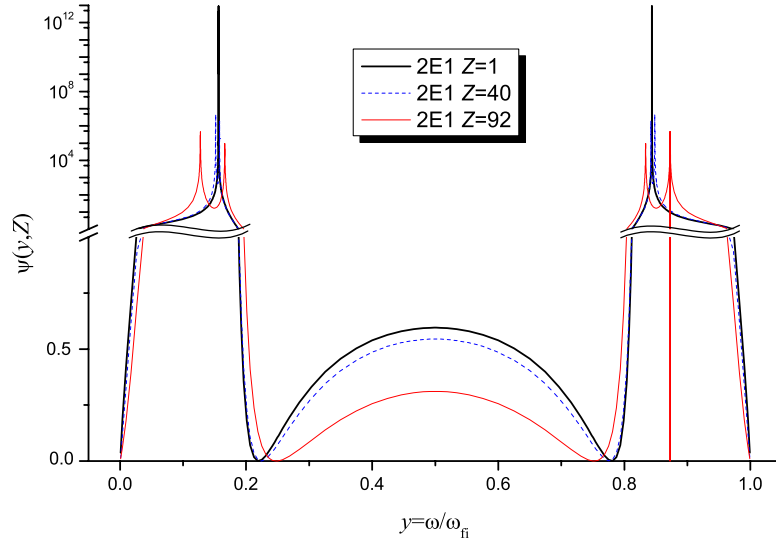


Figura 4.2: Distribuição em frequência $\psi(y)$ da transição $3s \rightarrow 1s$ para $Z=1$, 40, e 92. A variável y representa a fracção de energia de um dos dois fotões.

Tabela 4.6: Valores de transparências para várias transições.

| Transition | $y (Z = 1)$ | $y (Z = 40)$ | $y (Z = 92)$ |
|---------------------|--|--------------|--------------|
| $3s \rightarrow 1s$ | 0.780267 0.7803 ^a 0.7802 ^b 0.7803 ^c | 0.77628 | 0.7518 |
| $4s \rightarrow 1s$ | 0.737322 0.7373 ^a 0.7373 ^c | 0.73273 | 0.7034 |
| $6s \rightarrow 1s$ | 0.7032201 0.7098 ^a 0.7079 ^b 0.7098 ^b | 0.70497 | 0.6725 |

^a Florescu *et al* [27]

^b Quattropani *et al* [28]

^c Tung *et al* [25]

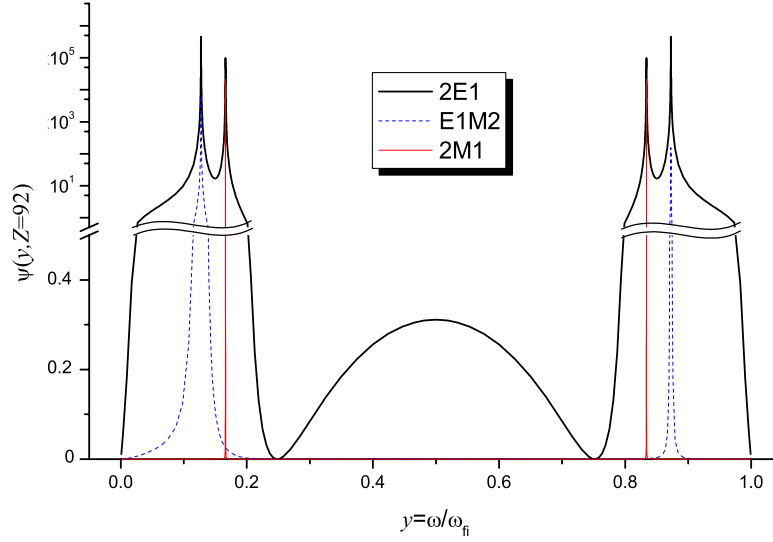


Figura 4.3: Distribuição em frequência das contribuições $E1$, $E1M2$ e $2M1$ para a transição $3s \rightarrow 1s$ com $Z=92$. A variável y representa a fracção de energia de um dos dois fótons.

igual à diferença de energia entre os estados $2p_{3/2}$ e $2p_{1/2}$. Na Figura 4.3 está representado a distribuição espectral das 3 contribuições multipolares de maior amplitude para a transição $3s \rightarrow 1s$ para $Z = 92$, nomeadamente as contribuições $2E1$, $E1M2$ e $2M1$. Comparando as Figuras 4.2 e 4.3 observa-se que a maior contribuição para a taxa total de emissão é multipolaridade $2E1$.

Resultados semelhantes à distribuição da Figura 4.2 podem ser observados na transição $6s \rightarrow 1s$ representada na Figura 4.4, na qual observa-se 8 ressonâncias e 10 zeros para $Z = 1$. Para $Z = 92$ é evidente que cada uma das 4 ressonâncias em torno do máximo (duas a baixa frequência e duas para alta frequência) também se dividem em pares de ressonâncias.

Não são observados zeros na distribuição $\psi_{3d_{3/2} \rightarrow 1s}(y, Z)$ que se encontra na Figura 4.5, somente o comportamento ressonante.

Na Figura 4.6 está representada a distribuição espectral das contribuições multipolares $E1M1$, $M1E1$, $E1E2$ e $E2E1$ para a transição $2p_{1/2} \rightarrow 1s$. Embora cada uma das contribuições seja assimétrica, a soma de cada par ($E1M1$, $M1E1$) e ($E1E2$, $E2E1$) é simétrica em torno de $y = 0.5$. Deste modo, a frequência total evidencia um comportamento simétrico como se pode observar da Figura 4.7.

Na Figura 4.8 está representado a distribuição em frequência para a contribuição

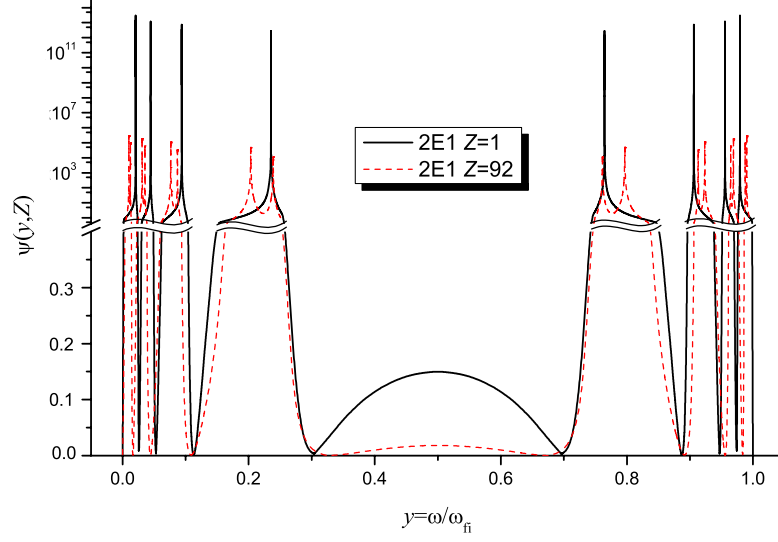


Figura 4.4: Distribuição em frequência $\psi(y)$ da transição $6s \rightarrow 1s$ para $Z=1$, 40, e 92. A variável y representa a fracção de energia de um dos dois fótons.

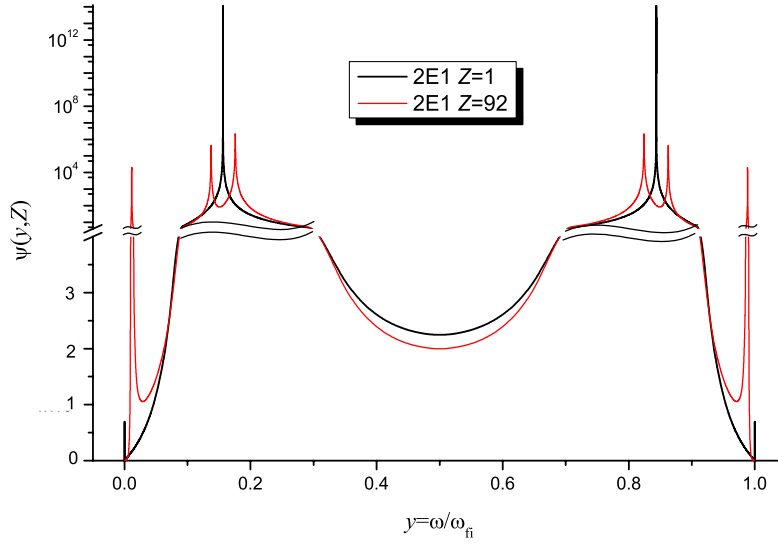


Figura 4.5: Distribuição em frequência $\psi(y)$ da transição $3d_{3/2} \rightarrow 1s$ para $Z=1$, 40, e 92. A variável y representa a fracção de energia de um dos dois fótons.

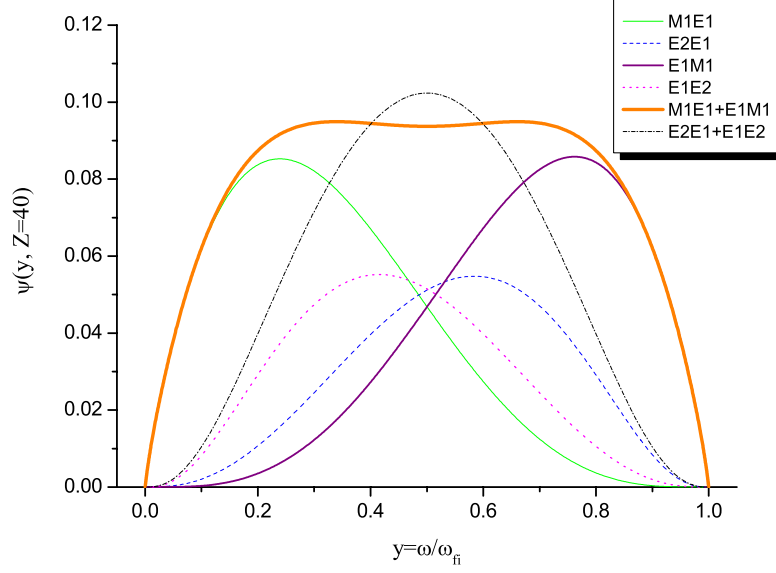


Figura 4.6: Distribuição em frequência $\psi(y)$ das contribuições $E1M1$ e $E1E2$ para a transição $2p_{1/2} \rightarrow 1s$ com $Z=40$.

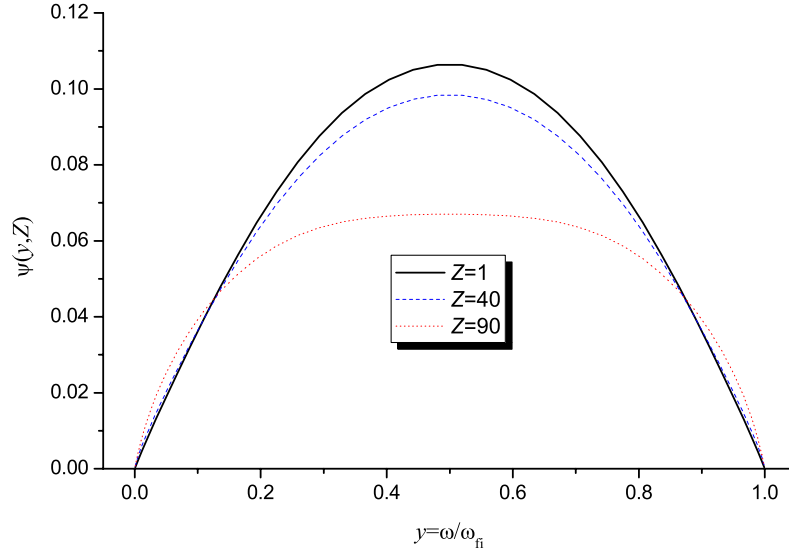


Figura 4.7: Distribuição em frequência $\psi(y)$ da transição $2p_{1/2} \rightarrow 1s$ para $Z=1$, 40, e 92. A variável y representa a fracção de energia de um dos dois fótons.

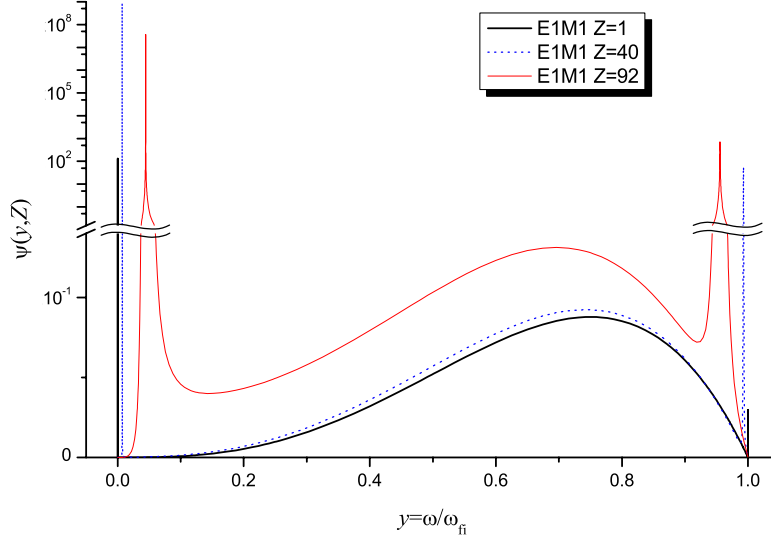


Figura 4.8: Distribuição em frequência $\psi(y)$ das contribuições $E1M1$ para a transição $2p_{3/2} \rightarrow 1s$.

multipolar $E1M1$ da transição $2p_{3/2} \rightarrow 1s$ e na Figura 4.9 o correspondente para a contribuição $E1E2$. No caso da contribuição $E1M1$, a ressonância na parte de baixos valores de y ocorre quando a energia de um dos fótons é igual à diferença de energia $E_{2p_{3/2}} - E_{2p_{1/2}}$, em quanto a ressonância da parte de alta frequência ocorre quando a energia de um dos fótons é igual a $E_{2p_{3/2}} - E_{2s_{1/2}}$. Por outro lado, só ocorre uma ressonância no caso da $E1E2$, uma vez que as regras de selecção só permite que uma das frequências tenha valor igual a $E_{2p_{3/2}} - E_{2p_{1/2}}$. A distribuição em frequência para a transição $2p_{3/2} \rightarrow 1s$ calculada com todas as contribuições multipolares está representada na Figura 4.10.

De acordo com Florescu [26], a taxa de decaimento para as transições $3s \rightarrow 1s$ e $3d \rightarrow 1s$ coincidem com os da emissão a um fóton $w_{3s,2p}^{E1} \simeq 6.3 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$ e $w_{3d,2p}^{E1} \simeq 6.5 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ respectivamente. Embora o resultado apresentado na referência [26] seja $w_{3s,2p}^{E1} \simeq 0.63 \times 10^9 \text{ sec}^{-1}$ (que suspeita-se que seja um erro no expoente) e isso é confirmado pelos resultados obtidos neste trabalho que se encontram listados na Tabela 4.5. Posteriormente esse resultado foi revisto por Cresser [29] e Florescu [30]. Identificou-se esse valor como a soma do processo de cascata de dois fótons, isto é a emissão de dois fótons independentes e o processo de emissão de dois fótons "puros".

$$W_{3s} = W_{3s}^{(1)} + W_{3s}^{(2)} \quad , \quad (4.2)$$

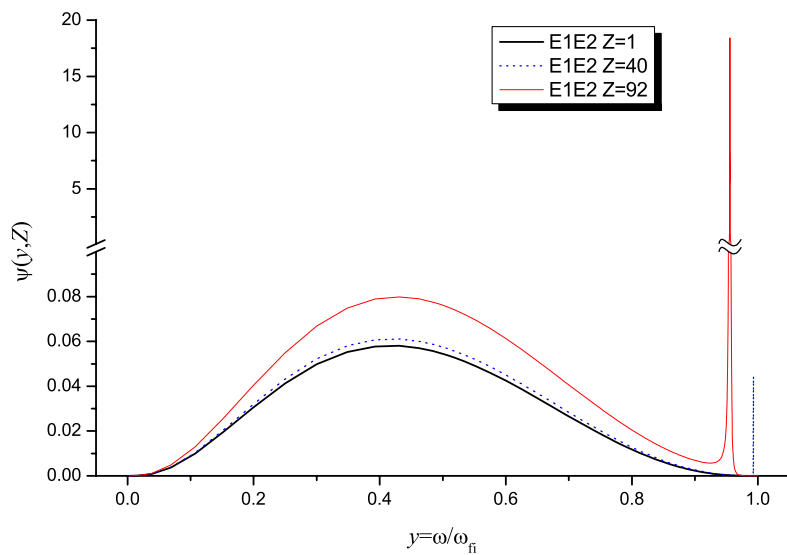


Figura 4.9: Distribuição em frequência $\psi(y)$ das contribuições $E1E2$ para a transição $2p_{3/2} \rightarrow 1s$.

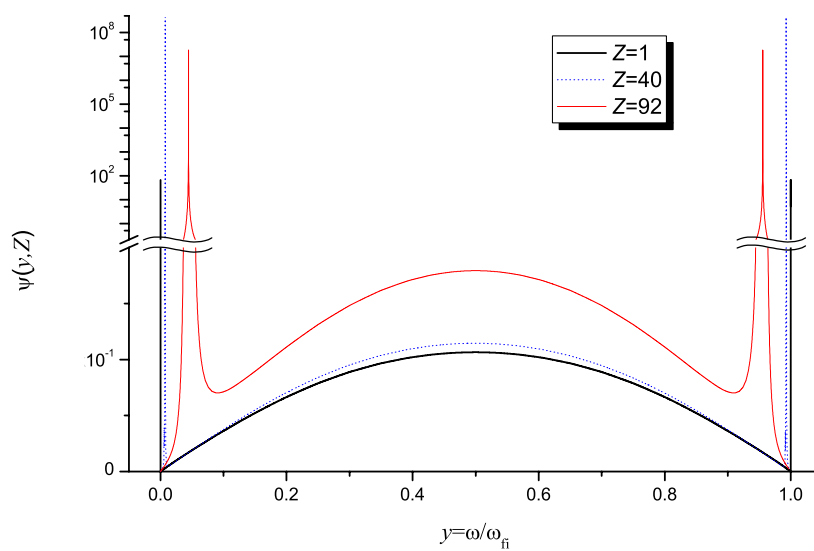


Figura 4.10: O mesmo da Figura (4.1) para a transição $2p_{3/2} \rightarrow 1s$.

$$\begin{aligned} W_{3s}^{(1)} &= 6.3169(6) \text{ s}^{-1} , \\ W_{3s}^{(2)} &= 8.2197 \text{ s}^{-1} . \end{aligned} \quad (4.3)$$

A diferença entre os dois processos advém de no caso de uma emissão "pura" os dois fótons são emitidos com os ângulos correlacionados. De modo a obter a taxa de emissão "pura" de dois fótons é necessário subtrair este termo da expressão (2.86) uma vez que o processo de cascata já está incluído em processos a um fóton [31, 32]. Seguidamente efectuou-se um estudo do termo de ressonância.

Na vizinhança de uma ressonância $\omega_1 \simeq \omega_r$ a expressão (2.86) para uma contribuição multipolar pode ser aproximada por

$$\frac{dW_{\lambda_1, L_1, \lambda_2, L_2}^r}{d\omega_1} \simeq \frac{\omega_1 \omega_2}{2(2\pi)^3 c^2 (2j_i + 1)} \left| \bar{S}^j(2, 1) \right|^2 , \quad (4.4)$$

em que $\bar{S}^j(2, 1)$ é uma aproximação de (2.87) definida por

$$\bar{S}^j(2, 1) = \frac{\bar{M}_{f, n_l}^{(\lambda_2, L_2)}(\omega_2) \bar{M}_{n_l, i}^{(\lambda_1, L_1)}(\omega_1)}{E_l^r - E_i + \omega_1 - i\Gamma_r^j/2} \Delta^j(2, 1) ,$$

uma vez que a maior contribuição para a soma em (2.87) provém de $E_{n_l} = E_l^r = -E_i + \omega_r$. O coeficiente 2 no denominador da expressão (4.4) resulta de (2.51). Esta dependência da frequência dada por

$$\frac{dW_{\lambda_1, L_1, \lambda_2, L_2}^r}{d\omega_1} \propto \frac{1}{(E_l^r - E_i + \omega_1)^2 + (\Gamma_r^j/2)^2} ,$$

define o perfil Lorentziano. Johnson [32] sugeriu que esta contribuição é devida ao processo em cascata.

Usando este resultado, a contribuição de uma ressonância para a taxa de emissão na qual é emitido um fóton $\Theta_1 L_1$ e outro $\Theta_2 L_2$.

$$\begin{aligned}
W_{\Theta_1 L_1, \Theta_2 L_2}^r &\simeq \sum_{\lambda_{\theta_1}, \lambda_{\theta_2}, j} \frac{\left(\bar{M}_{f, n_l}^{(\lambda_{\theta_2}, L_2)}(\omega_t - \omega_r) \bar{M}_{n_l, i}^{(\lambda_{\theta_1}, L_1)}(\omega_r) \Delta^j(2, 1) \right)^2}{2(2\pi)^3 c^2 (2j_i + 1)} \\
&\quad \times \int_{\omega_r - \delta\omega}^{\omega_r + \delta\omega} \frac{\omega_1(\omega_t - \omega_1)}{\left| E_r^j - E_i + \omega_1 - i\Gamma_r^j/2 \right|^2} d\omega_1 \\
&\simeq \sum_{\lambda_{\theta_1}, \lambda_{\theta_2}, j} \frac{\left(\bar{M}_{f, n_l}^{(\lambda_{\theta_2}, L_2)}(\omega_t - \omega_r) \bar{M}_{n_l, i}^{(\lambda_{\theta_1}, L_1)}(\omega_r) \Delta^j(2, 1) \right)^2}{2(2\pi)^3 c^2 (2j_i + 1)} \\
&\quad \times \left[\frac{2\omega_r(\omega_t - \omega_r) \arctan\left(\frac{2(-E_i + E_r^j + \omega_t)}{\Gamma_r^j}\right)}{\Gamma_r^j} \right]_{\omega_r - \delta\omega}^{\omega_r + \delta\omega} \\
&\simeq \sum_{\lambda_{\theta_1}, \lambda_{\theta_2}, j} \frac{\left(\bar{M}_{f, n_l}^{(\lambda_{\theta_2}, L_2)}(\omega_t - \omega_r) \bar{M}_{n_l, i}^{(\lambda_{\theta_1}, L_1)}(\omega_r) \Delta^j(2, 1) \right)^2}{2(2\pi)^3 c^2 (2j_i + 1)} \\
&\quad \frac{2\omega_r(\omega_t - \omega_r)\pi}{\Gamma_r^j} \tag{4.5}
\end{aligned}$$

A taxa de emissão espontânea de um dado nível i para um nível f através da emissão espontânea de um fóton Θ, L ($\Theta = E, M$) é dada por em unidades atômicas por

$$w_{i \rightarrow f}^{\Theta, L} = \frac{2\omega[j_f]}{c[L]} \left(\begin{array}{ccc} j_i & L & j_i \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{array} \right)^2 \left| \sum_{\lambda_\Theta} \bar{M}_{f, i}^{\lambda_\Theta, L} \right|^2. \tag{4.6}$$

Os valores de λ_Θ foram definidos em (2.50). Como se está a utilizar soluções precisas da equação de Dirac, a contribuição $\bar{M}_{f, i}^{-1, L}$ pode ser desprezada.

Substituindo (4.6) em (4.5) vem

$$W^r = \sum_j \frac{w_{n_r j \rightarrow f}^{\theta_2, L_2}}{\Gamma_r^j} w_{i \rightarrow n_r j}^{\theta_1, L_1}. \tag{4.7}$$

A contribuição ressonante consiste em produtos de transições a um fóton como é esperado num processo de cascata.

A largura do nível Γ_{n_l} de um nível n_l , é igual, em unidades atômicas à taxa total de emissão espontânea de um fóton desse nível para todos os níveis inferiores cuja maior contribuição provém do estado final fundamental. Uma excepção ocorre para o nível $2s$. Este estado metastável pode decair através de dois processos: por um único

fotão dipolar magnético ou através da emissão de dois fotões cuja maior contribuição consiste em dois fotões dipolares eléctricos .

Como exemplo da aplicação de (4.7) considere-se a contribuição multipolar da transição $3s \rightarrow 1s$. Os estados intermédios na qual um ω_1 corresponde a ω_r são $2p_{1/2}$ e $2p_{3/2}$. Assim, aplicando (4.7) vem

$$\begin{aligned} W_{3s \rightarrow 1s}^{r,2E1} &= w_{3s \rightarrow 2p_{1/2}}^{E1} + w_{3s \rightarrow 2p_{3/2}}^{E1} \\ &= 2.106 \times 10^6 + 4.212 \times 10^6 \\ &= 6.318 \times 10^6 \text{ s}^{-1} \end{aligned} \quad (4.8)$$

consideranto as larguras dos níveis com os seguintes valores

$$\begin{aligned} \Gamma_{2p_{1/2}} &= w_{2p_{1/2} \rightarrow 1s}^{1,1} \\ \Gamma_{2p_{3/2}} &= w_{2p_{3/2} \rightarrow 1s}^{1,1} \end{aligned} \quad (4.9)$$

Como se observa, o valor obtido para $W_{3s \rightarrow 1s}^{r,2E1}$ concorda com o valor não aproximado $6.317932 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$ listado na Tabela 4.5. Comparou-se os valores aproximados e não aproximados vários valores de Z e concluiu-se que a diferença é menor que 1%.

Para o caso das transições $3d_{3/2} \rightarrow 1s$ e $3d_{5/2} \rightarrow 1s$ obtemos

$$\begin{aligned} W_{3d_{3/2} \rightarrow 1s}^{r,2E1} &= w_{3d_{3/2} \rightarrow 2p_{1/2}}^{E1} + w_{3d_{3/2} \rightarrow 2p_{3/2}}^{E1} \\ &= 5.391 \times 10^7 + 1.078 \times 10^7 \\ &= 6.469 \times 10^7 \text{ s}^{-1} \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned} W_{3d_{5/2} \rightarrow 1s}^{r,2E1} &= w_{3d_{5/2} \rightarrow 2p_{3/2}}^{E1} \\ &= 6.469 \times 10^7 \text{ s}^{-1} \end{aligned} \quad (4.11)$$

Estes valores concordam em 0.5% com os valores $W_{3d_{3/2} \rightarrow 1s}^{2E1} = 6.466712 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ e $W_{3d_{5/2} \rightarrow 1s}^{2E1} = 6.446629 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ respectivamente.

A transição $3d_{3/2} \rightarrow 2s$ é um exemplo de uma transição em que o estado final não é o estado fundamental. A expressão (4.7) para este caso ($Z = 92$) é a seguinte:

$$\begin{aligned}
W_{3d_{3/2} \rightarrow 2s}^{r2E1} &= \frac{w_{3p_{1/2} \rightarrow 2s}^{E1}}{w_{3p_{1/2} \rightarrow 1s}^{E1}} w_{3d_{3/2} \rightarrow 3p_{1/2}}^{E1} \\
&\quad + \frac{w_{2p_{3/2} \rightarrow 2s}^{E1}}{w_{2p_{3/2} \rightarrow 1s}^{E1}} w_{3d_{3/2} \rightarrow 2p_{3/2}}^{E1} \\
&= \frac{2.329 \times 10^{15}}{1.054 \times 10^{16}} 9.710 \times 10^{12} \\
&\quad + \frac{8.739 \times 10^{13}}{3.922 \times 10^{16}} 7.477 \times 10^{14} \\
&= 3.8116 \times 10^{12} \text{ s}^{-1} .
\end{aligned} \tag{4.12}$$

A diferença entre este valor aproximado e o valor $W_{3d_{3/2} \rightarrow 1s}^{2E1} = 3.818681 \times 10^{12} \text{ sec}^{-1}$ dado na Tabela 4.5 é de 0.2%.

Capítulo 5

Estudo teórico de transições em iões heliumoides

Um outro objectivo deste trabalho era de obter as expressões necessárias ao cálculo taxas de decaimento das transições a dois fotões em sistemas com dois electrões.

Esta etapa parte da expressão (2.39) sem o termo de ressonância por uma questão de simplicidade. Esta dedução pode ser encontrada em [2] com mais detalhe.

$$B_{L_1 M_1 \lambda_1}^{L_2 M_2 \lambda_2} = \sum_n \frac{\langle f | \tilde{a}_{L_2 M_2}^{(\lambda_2)} | n \rangle \langle n | \tilde{a}_{L_1 M_1}^{(\lambda_1)} | i \rangle}{E_n - E_i + \omega_1} . \quad (5.1)$$

Tal como foi referido anteriormente esta expressão advém da definição da função de Green (2.16) portanto neste caso a função de onda n não é hidrogenoíde mas sim uma função construída da seguinte forma

$$\begin{aligned} |n_1 n_2 J M\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | J M \rangle |n_1 j_1 m_1 n_2 j_2 m_2\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | J M \rangle \begin{vmatrix} \psi_{n_1 j_1 m}(\mathbf{r}_1) & \psi_{n_1 j_1 m}(\mathbf{r}_2) \\ \psi_{j_2 m_2}(\mathbf{r}_1) & \psi_{j_2 m_2}(\mathbf{r}_2) \end{vmatrix} , \end{aligned} \quad (5.2)$$

onde n_i, j_i e m_i são o número quântico principal, o número orbital quântico e a projecção segundo um eixo respectivamente. J é o numero quântico orbital total do acoplamento de j_1 com j_2 e sendo M a sua projecção segundo um dado eixo. A única restrição no tipo de funções de onda a usar em (5.1) é que tem de ser completa (relação de fecho). O operador a um electrão $\tilde{a}_{LM}^{(\lambda)}$ é substituído por dois operadores actuado cada um num electrão individual.

$$a_{LM}^{(\lambda)*} \rightarrow a_{LM}^{1(\lambda)*} + a_{LM}^{2(\lambda)*} \quad . \quad (5.3)$$

Considerando o segundo electrão como espectador, o operador $a_{LM}^{2(\lambda)*}$ terá um valor unitário e também as funções a um electrão ortonormais obtêm-se o seguinte resultado

$$\begin{aligned} \left\langle n_{1f} n_{2f} J_f M_f \left| a_{LM}^{(\lambda)*} \right| n_{1i} n_{2i} J_i M_i \right\rangle &= \sum_{m_{1f}, m_{1i}, m_2} \langle j_{1f} m_{1f} j_{2f} m_2 | J_f M_f \rangle \langle j_{1i} m_{1i} j_{2f} m_2 | J_i M_i \rangle \\ &\times \left\langle n_{1f} j_{1f} m_{1f} \left| a_{LM}^{1(\lambda)*} \right| n_{1i} j_{1i} m_{1i} \right\rangle \quad . \end{aligned} \quad (5.4)$$

Utilizando o teorema de Wigner-Eckart, vem

$$\begin{aligned} \left\langle n_{1f} j_{1f} m_{1f} \left| a_{LM}^{1(\lambda)*} \right| n_{1i} j_{1i} m_{1i} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2j_{1f} + 1}} \langle j_{1i} m_{1i} LM | j_{1f} m_{1f} \rangle \\ &\times \left\langle n_{1f} j_{1f} \left\| a_L^{1(\lambda)*} \right\| n_{1i} j_{1i} \right\rangle \quad . \end{aligned} \quad (5.5)$$

Considerando a regra de soma

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha, \beta, \delta} \langle a \alpha b \beta | c \gamma \rangle \langle d \delta b \beta | f \varepsilon \rangle \langle a \alpha e \varepsilon | d \delta \rangle &= \sqrt{(2c+1)(2d+1)} (-1)^{b+c+d+e} \\ &\times \langle c \gamma e \varepsilon | f \varepsilon \rangle \left\{ \begin{matrix} a & b & c \\ f & e & d \end{matrix} \right\} \quad , \end{aligned} \quad (5.6)$$

e a relação entre o símbolo 3-j e o símbolo Clebsh-Gordan, chega-se a

$$\begin{aligned} \left\langle n_{1f} n_{2f} J_f M_f \left| a_{LM}^{(\lambda)*} \right| n_{1i} n_{2i} J_i M_i \right\rangle &= (-1)^{J_f - M_f + j_{1f} + j_{2f} + J_i + L} [J_f, J_i]^{1/2} \\ &\times \begin{pmatrix} J_f & L & J_i \\ -M_{J_f} & M & M_{J_i} \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} J_f & L & J_i \\ j_{1i} & j_2 & j_{1i} \end{matrix} \right\} \\ &\times \left\langle n_{1f} j_{1f} \left\| a_L^{(\lambda)*} \right\| n_{1i} j_{1i} \right\rangle \quad . \end{aligned} \quad (5.7)$$

O elemento de matriz reduzido é definido como na expressão (2.40) sem o termo obtido do teorema de Wigner-Eckart,

$$\begin{aligned} \left\langle n_{1f} j_{1f} \left\| a_L^{(\lambda)*} \right\| n_{1i} j_{1i} \right\rangle &= (-1)^{L+\lambda-1} (-1)^{j_{1f}-1/2} \left(\frac{4\pi}{2L+1} \right)^{1/2} \\ &\times [j_{1f}, j_{1i}]^{1/2} \begin{pmatrix} j_{1f} & L & j_{1i} \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \bar{M}_{f,i}^{(\lambda,L)} \quad . \end{aligned} \quad (5.8)$$

Substituindo (5.7) em (5.1) e efectuando novamente o somatório, neste caso, em M_f e a média em M_i , chega-se a

$$\frac{d\overline{W}}{d\omega_1} = \frac{\omega_1\omega_2}{(2\pi)^3 c^2} \sum_{L_1, M_1, \lambda_1, L_2, M_2, \lambda_2, M_f, M_i} \left| \sum_{J_n j_{1n}} [S^{J_n j_{1n}}(2, 1) \theta^{J_n}(2, 1) + S^{J_n j_{1n}}(1, 2) \theta^{J_n}(1, 2)] \right|^2. \quad (5.9)$$

O termo $\theta^{J_n}(2, 1)$ é definido de modo semelhante a (2.45) mas em função dos momentos orbitais totais, isto é,

$$\theta^{J_n}(2, 1) = [J_n]^{1/2} \sum_{M_{J_n}} (-1)^{M_{J_n} + M_f + 1} \begin{pmatrix} J_f & L_2 & J_n \\ -M_f & M_2 & M_{J_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_n & L_1 & J_i \\ -M_{J_n} & M_1 & M_i \end{pmatrix}. \quad (5.10)$$

Quanto ao termo $S^{J_n j_{1n}}(2, 1)$, esta é definida tal como no caso de (2.82) como

$$S^{J_n j_{1n}}(2, 1) = \sum_l \sum_{n_l} \frac{\bar{M}_{f, n_l}^{(\lambda_2, L_2)}(\omega_2) \cdot \bar{M}_{n_l, i}^{(\lambda_1, L_1)}(\omega_1)}{E_{n_l} - E_i + \omega_1} \Delta^{J_n j_{1n}}(2, 1) \Pi^l(2, 1), \quad (5.11)$$

com $\Delta^{J_n j_{1n}}(2, 1)$ definido como

$$\begin{aligned} \Delta^{J_n j_{1n}}(2, 1) &= \frac{4\pi [j_{1i}, j_{1n}, j_{1f}]^{1/2}}{[L_1, L_2]^{1/2}} \begin{pmatrix} j_{1f} & L_2 & j_{1n} \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{1n} & L_1 & j_{1i} \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \\ &\times [j_{1n}]^{1/2} [J_i, J_n, J_f]^{1/2} \left\{ \begin{pmatrix} J_f & L_2 & J_n \\ j_{1n} & j_2 & j_{1f} \end{pmatrix} \right\} \left\{ \begin{pmatrix} J_n & L_1 & J_i \\ j_{1i} & j_2 & j_{1n} \end{pmatrix} \right\} \end{aligned} \quad (5.12)$$

Os elementos de matriz $\bar{M}_{f, i}^{(\lambda, L)}$ são definidos tal como em (2.41) com P e Q obtidos num processo auto-consistente da equação de Dirac tendo em conta uma interacção entre os dois electrões. De modo a que o valor da taxa de decaimento de dois fótons seja invariante na *gauge* é necessário que as funções de onda sejam exactas como foi referido anteriormente. Esta invariância é uma medida de precisão das funções de onda P , Q usadas no processo.

As regras de soma são semelhantes ao caso anterior (2.47) com a diferença que neste caso são em termos dos momentos angulares totais,

$$\sum_{M_1, M_2, M_f, M_i} \theta^{J_n}(2, 1) \theta^{J'_n}(2, 1) = \delta_{J_n, J'_n} \quad (5.13)$$

$$\sum_{M_1, M_2, m_f, m_i} \theta^{J_n}(2, 1) \theta^{J'_n}(1, 2) = [J_n, J'_n]^{1/2} (-1)^{2J'_n + L_1 + L_2} \begin{pmatrix} J_f & J'_n & L_1 \\ J_i & J_n & L_2 \end{pmatrix}.$$

Tabela 5.1: Contribuições multipolares incluídas neste cálculo para a taxa de emissão espontânea da transição $1s2s\ ^1S_0 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$.

| Múltipolos | Contribuição (s^{-1}) | | |
|------------|---------------------------|---------------|---------------|
| | $Z = 2$ | $Z = 40$ | $Z = 92$ |
| $2E1$ | 5.26604 (2) | 3.196628 (10) | 3.790782 (12) |
| $2M1$ | 1.413673 (-8) | 1.548050 (5) | 7.706030 (8) |
| $2E2$ | 5.024747 (-9) | 5.004155 (4) | 1.793060 (8) |
| $2M2$ | 3.109735 (-18) | 5.187699 | 6.865764 (5) |
| Total | 5.266040(2) | 3.196648 (10) | 3.791732 (12) |

Aplicando estas regras em (5.9) vem

$$\begin{aligned}
\frac{d\bar{W}}{d\omega_1} = & \frac{\omega_1\omega_2}{(2\pi)^3c^2} \sum_{L_1,\lambda_1,L_2,\lambda_2} \sum_{j_{1n}j'_{1n}} \sum_{J_n} S^{J_n j_{1n}}(2,1) S^{J_n j'_{1n}}(2,1) + S^{J_n j_{1n}}(1,2) S^{J_n j'_{1n}}(1,2) \\
& + \sum_{J'_n} (-1)^{2J'_n+L_1+L_2} [J_n, J'_n]^{1/2} \begin{pmatrix} J_f & J'_n & L_1 \\ J_i & J_n & L_2 \end{pmatrix} \\
& \times \left\{ S^{J_n j_{1n}}(2,1) S^{J'_n j'_{1n}}(1,2) + S^{J_n j_{1n}}(1,2) S^{J'_n j'_{1n}}(2,1) \right\} .
\end{aligned} \tag{5.14}$$

Comparando a expressão (5.14) com a expressão correspondente da referência [2], observa-se uma discrepância que poderá ter origem na inclusão de um delta de Kroneger extra a actuar no momento angular do electrão 1, $\delta(j_{1n}, j'_{1n})$.

5.1 Resultados preliminares

Por forma a se obter resultados preliminares considerou-se os dois electrões sem interacção mútua, ou seja, com os valores dos elementos de matriz radiais em (5.11) dados como o caso hidrogenoíde. Esta primeira aproximação é importante de modo a testar, do ponto de vista computacional, a expressão implementada.

Estudou-se duas transições em sistemas heliumoides: $1s2s\ ^1S_0 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ e $1s2s^3S_0 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$. As contribuições multipolares mais significativas incluídas no cálculo da taxa de decaimento destas transições estão presentes nas Tabelas 5.1 e 5.2, respectivamente.

Na Tabela 5.3 estão listadas as taxas totais de decaimento a dois fotões para as transições estudadas. Como se pode observar da Tabela 5.3, a soma das duas transições tem um valor semelhante ao caso hidrogenoíde, como se pode esperar uma vez que nesta aproximação não se considerou qualquer interacção entre os dois electrões.

Tabela 5.2: Contribuições multipolares incluídas neste cálculo para a taxa de emissão espontânea da transição $1s2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$.

| Multípolos | Contribuição (s^{-1}) | | |
|------------|---------------------------|---------------|---------------|
| | $Z = 2$ | $Z = 40$ | $Z = 92$ |
| $2E1$ | 2.278424 (−6) | 6.543973 (6) | 1.169908 (10) |
| $E1M2$ | 6.989675 (−8) | 6.918716 (5) | 2.800259 (9) |
| $E2M1$ | 1.178047 (−9) | 1.290163 (4) | 7.488211 (7) |
| $2M1$ | 3.333527 (−16) | 6.017853 (2) | 1.157289 (8) |
| $2M2$ | 6.396849 (−19) | 1.012846 | 1.034116 (5) |
| $2E2$ | 3.713150 (−20) | 5.934250 (−2) | 6.016718 (3) |
| Total | 2.349491 (−6) | 7.249348 (6) | 1.469005 (10) |

Tabela 5.3: Taxa total de emissão espontânea de dois fótons (s^{-1}) para as transições $1s2s\ ^1S_0 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ e $1s2s\ ^3S_0 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$

| Taxa total de decaimento, ω (s^{-1}) | | | |
|---|-----------------|---------------------------|---------------|
| $Z = 2$ | $f \setminus i$ | $1s2s\ ^1S_0$ | $1s2s\ ^3S_0$ |
| | $1s^2\ ^1S_0$ | 5.266040(2) | 2.349491 (−6) |
| | | 5.266038(−2) ^a | |
| | | 5.266040(2) ^b | |
| $Z = 40$ | $f \setminus i$ | | |
| | $1s^2\ ^1S_0$ | 3.196648(10) | 7.249348 (6) |
| | | 3.198907(10) ^a | |
| | | 3.197372(10) ^b | |
| $Z = 92$ | $f \setminus i$ | $2s_{1/2}$ | $2p_{1/2}$ |
| | $1s^2\ ^1S_0$ | 3.791733(12) | 1.469005 (10) |
| | | 3.836350(12) ^a | |
| | | 3.806423(12) ^b | |

^a $2s \rightarrow 1s$ hidrogenóides^b Soma das duas transições

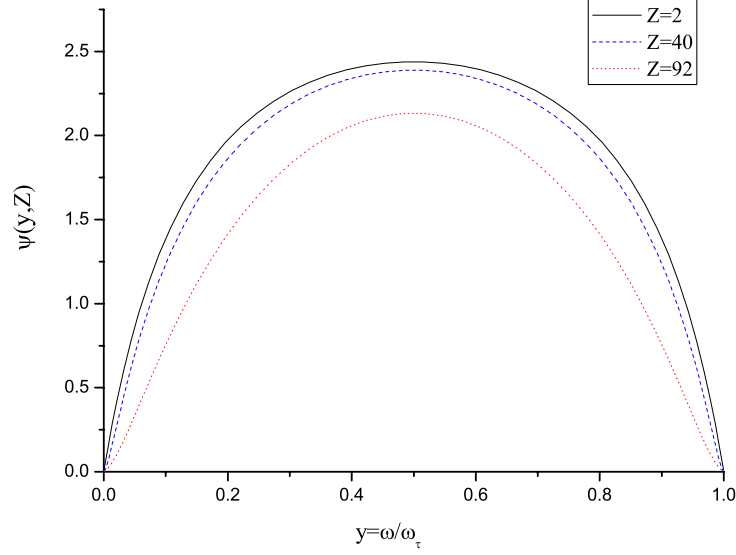


Figura 5.1: Distribuição em frequência $\psi(y)$ da transição $1s2s^1S_0 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ para $Z=2, 40$, and 92 . A variável y representa a fracção de energia de um dos dois fotões.

Na Figura 4.1 está representado a forma da distribuição em frequência das transições estudadas $2s \rightarrow 1s$ para $Z = 1, 40$ e 92

O perfil da distribuição em frequência obtido para o caso da transição $1s2s^1S_0 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ é semelhante ao caso da transição $2s \rightarrow 1s$ em iões hidrogenoides como se pode observar da Figura 4.1. Por outro lado observa-se que o perfil da distribuição para a transição $1s2s^3S_0 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ para a contribuição $2E1$ tem um comportamento diferente. Sendo esta distribuição simétrica, tem um máximo perto da origem e decresce até um valor quase nulo quando as frequências dos fotões tem valor igual, isto é, quando $y = 0.5$. O comportamento das duas distribuições é semelhante ao obtido, por exemplo, por Derevianko [33].

Tendo em conta que se obteve invariância de *gauge* nos cálculos efectuados e que as distribuições obtidas foram as esperadas, pode-se afirmar que a expressão (5.14) implementada do ponto de vista computacional

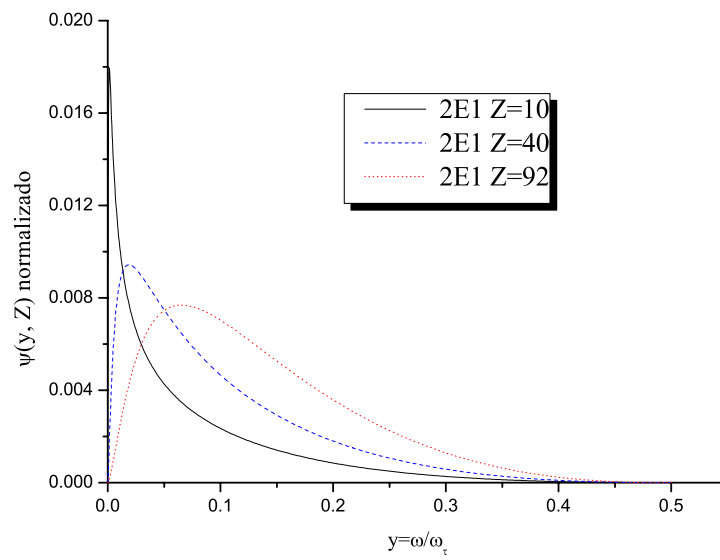


Figura 5.2: Distribuição em frequência $\psi(y)$ da transição $1s2s^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ para $Z=10, 40$, and 92 . A variável y representa a fracção de energia de um dos dois fotões estando.

Capítulo 6

Conclusão

Neste trabalho foram evidentes os efeitos relativistas em transições a dois fótons em sistemas hidrogenoides. Não só devido ao facto de se ter efectuado o cálculo de outras contribuições multipolares (no limite não relativista só a contribuição dipolar eléctrica é não nula), mas também por se ter tido em conta a estrutura fina (desdobramento em j) como se pode observar na Figura 4.2.

Estes resultados obtidos estão de acordo com os resultados relativistas e não-relativistas publicados. Relativamente aos resultados relativistas publicados por Labzowsky [22], os nossos resultados diferem 0.1% e 0.7% para $Z = 1$ e $Z = 92$, respectivamente. Relativamente aos valores não-relativistas de Tung *et al* [25], os resultados calculados neste trabalho diferem entre 0.02% e 1% dos primeiros.

Os resultados obtidos neste trabalho relativamente a iões hidrogenoides serão submetidos a publicação na forma de artigo na revista "The European Physical Journal D" (Apêndice A).

Foi alcançado o objectivo de se obter resultados preliminares em relação a transições a dois fótons em iões heliúmoides.

Futuramente, pretende-se estudar as transições em sistemas de dois electrões considerando interacção mútua. Como foi referido na introdução, um dos objectivos do estudo deste tipo de transições é o de testar a conservação de paridade em sistemas atómicos (PNC, parity non conservation) e este efeito é maior em sistemas heliúmoides do que em sistemas hidrogenoides.

Pretende-se também estudar em mais detalhe a remoção do processo de cascata do cálculo da taxa de decaimento a dois fótons.

Bibliografia

- [1] J. Santos, F. Parente, P. Indelicato, Eur. Phys. J. D **3**, (1998) 43
- [2] J. Santos, P. Patte, F. Parente, P. Indelicato, Eur. Phys. J. D **13**, (2001) 27
- [3] Jr. Spitzer, J. Greenstein, Astrophys. J. **114**, (1971) 681
- [4] S. Seager, D. Sasselov, D. Scott, Astrophys. J. **L1**, (1999), 523
- [5] Y. Zeldovich, V. Kurt, R.Syunyaev, Zh. Exsper. Teor. **55**, (1968) 278
- [6] C. Schwob, *et al.*, Phys. Rev. Lett. 82 (1999) 4960
- [7] B. de Beauvoir, *et al.*, Eur. Phys. J. D 12 (2000) 61
- [8] H. Gould, R. Marrus, Phys. Rev. A **28**, (1983) 2001
- [9] B. de Beauvoir, *et al*, Eur. Phys. J. D **12**, (2000) 61
- [10] W. Perrie, A. Duncan, H. Beyer, H. Kleinpoppen, Phys. Rev. Lett. **54**, (1985) 1790
- [11] M. Maul, A. Schäfer, W. Greiner, P. Indelicato, Phys. Rev. A **53**, (1996) 3915
- [12] G. Soff, *et al.* "Effects of QED and beyond from the atomic binding energy"(APAC2000 Conference), "Hyperfine Interactions"
- [13] R. P. Feynman, Phys. Rev. A **76**, (1949) 767
- [14] A. Akhiezer, V. Beretertsii, Quantum Electrodynamics (Interscience Publishers, New York 1965)
- [15] A. Surzhykov, P. Koval, S. Fritzsche, Phy. Rev. A **71**, (2005) 3
- [16] H. M. T. Nganso, M. G. K. Njock, , J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **40**, (2007) 807
- [17] I. P. Grant, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **12** (1974) 1458

-
- [18] C. deBoor, A Practical Guide to Splines (Springer)
 - [19] W. R. Johnson, S. A. Blundell, J. Sapirstein, Phys. Rev. A **37**, (1988)
 - [20] U. D. Jentschura, J. Phys. A: Math. Theor. 40 (2007) F223–F227
 - [21] R. Greiner, Quantum Electrodynamics (Springer, Berlin 2003)
 - [22] L. Labzowsky, A. Shonin, D. Solov'yev, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **38**, (2005) 265
 - [23] L. Labzowsky, D. Solov'yev, G. Plunien, G. Soff, Eur. Phys. J. D **37**, (2006) 335
 - [24] S. Goldman, G. Drake, Phys. Rev. A **24**, (1981) 183
 - [25] J. Tung, X. Ye, G. Salamo, F. Chan, Phys. Rev. A **30**, (1984) 1175
 - [26] V. Florescu, Phys. Rev. Lett. **30**, (1984) 2441
 - [27] V. Florescu, S. Patrascu, O. Stoican, Phys. Rev. A **36**, (1987) 2155
 - [28] A. Quattropiani, F. Bassani, S. Carillo, Phys. Rev. A **25**, (1982) 3079
 - [29] J. D. Cresser, A. Z. Tang, G. J. Salamo, F. T. Chan, Phys. Rev. A **33**, (1986) 1677
 - [30] V. Florescu, I. Schneider, I. Mihailescu, Phys. Rev. A **34**, (1988) 2189
 - [31] G. Drake, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B **9**, (1985) 465
 - [32] I. M. Savukov, W. R. Johnson, Phys. Rev. A **66**, (2002) 062507
 - [33] A. Derevianko, W. R. Johnson, Phys. Rev. A **56**, (1997) 1288